Institut für Numerische und Angewandte Mathematik 05.06.2012
FB Mathematik und Informatik der Universität Münster
Prof. Dr. Christian Engwer, Dipl. Math. Dipl. Inf. Sebastian Westerheide

---

Übung zur Vorlesung

Wissenschaftliches Rechnen

SS 2012 — Blatt 6

Abgabe: 12.06.2012, 10:00 Uhr, Briefkasten 89
Code zusätzlich per e-mail an `sebastian.westerheide@uni-muenster.de`

Aufgabe 1 (Damköhler-Zahl) (4 Punkte)

Mit Hilfe einer Reaktions-Diffusions-Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta c + f(c) \tag{1}$$

lässt sich die Entwicklung der Konzentration c einer Substanz C modellieren, die von zwei Prozessen beeinflusst wird: Lokalen chemischen Reaktionen, durch welche C transformiert wird (ggf. in Wechselwirkung mit anderen Substanzen) und Diffusion die dafür sorgt, dass sich C räumlich ausbreitet.
Für eine bestimmte Reaktionskinetik ergeben sich die Reaktionskonstante k und die Gesamtordnung n der Reaktion. Bezüglich der Diffusion ergibt sich eine charakteristische Länge L und die Diffusionskonstante D. Mit diesen Parametern lässt sich die Reaktionsgeschwindigkeit $v_r := k \cdot c^n$ und die Diffusionsgeschwindigkeit $v_d := c/L^2 \cdot D$ bestimmen. Der Quotient aus Reaktions- und Diffusionsgeschwindigkeit wird Damköhler-Zahl zweiter Ordnung bezeichnet:

$$\frac{v_r}{v_d} = \frac{k \cdot L^2 \cdot c^{n-1}}{D}.$$

Wir wollen ein Reaktions-Diffusions-Problem auf einem kartesischen Gitter simulieren, welches die Gitterweite $h = 2^{-i}$, $i \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ besitzt. Genauer betrachten wir eine fiktive Reaktion mit den Parametern $k = 4$, $n = 2$ (z.B. $C + C \longrightarrow Z$), sowie eine fiktive Diffusion mit $D = 10$.
Betrachten Sie im Folgenden eine Momentaufnahme mit aktueller Konzentration $c = 320$.

(a) Erläutern Sie den Einfluss der Gitterweite h auf die Damköhler-Zahl.

(b) Was bedeutet dies für die Diffusion und die Reaktion?

(c) Was bedeutet dies für unsere Simulation, speziell hinsichtlich des zu wählenden numerischen Verfahrens?

Tipp: Aufgrund des Gitters ergibt sich die charakteristische Länge $L = h$. In (a) und (b) können drei interessante Fälle unterschieden werden.

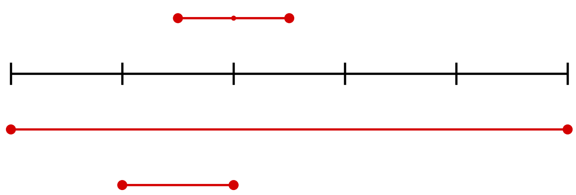

Abbildung 1: Skizze zur Massenerhaltung, in 1D

Aufgabe 2 (Massenerhaltung) (4 Punkte)

Gegeben sei die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f \tag{2}$$

für den homogenen Fall $f = 0$ auf einem n-dimensionalen Gebiet Ω. In der Vorlesung haben Sie das Prinzip der Massenerhaltung und verschiedene numerische Verfahren zum Lösen von partiellen Differentialgleichungen wie (2) kennengelernt.

(a) Betrachten Sie folgende numerischen Verfahren:

- Die Finite Elemente Methode mit stückweise linearen Ansatzfunktionen auf einem Dreiecksgitter, im Falle der homogenen Neumann-Randbedingung

$$\nabla u \cdot n = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega$$

- Die Finite Elemente Methode mit stückweise linearen Ansatzfunktionen auf einem Dreiecksgitter, im Falle der homogenen Dirichlet-Randbedingung

$$u = 0 \quad \text{auf} \quad \partial\Omega$$

- Das zellzentrierte Finite-Volumen-Verfahren
- Das knotenzentrierte Finite-Volumen-Verfahren

Erläutern Sie, in welchen Vektorräumen die Test- und Ansatzfunktionen in den verschiedenen Fällen liegen.

(b) Wir betrachten drei verschiedene Arten von Massenerhaltung (vgl. Abbildung 1):

- Die globale Massenerhaltung auf ganz Ω
- Die lokale Massenerhaltung auf jeder Gitterzelle
- Die lokale Massenerhaltung auf jeder Zelle des dualen Gitters (dieses besteht aus Zellen, deren Mittelpunkt in den Knoten des ursprünglichen Gitters liegt)

Erläutern Sie für jedes Verfahren aus (a) mit detaillierter Begründung, welche Arten von Massenerhaltung jeweils garantiert sind.