

---

Übung zur Vorlesung  
**Wissenschaftliches Rechnen**  
 WS 2017/18 — Blatt 8

---

**Abgabe:** 07.12.2017, 10:00 Uhr, Briefkasten 111  
 Code zusätzlich per e-mail an `marcel.koch@uni-muenster.de`

**Aufgabe 1** (Lie-Trotter-Splitting) (4 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie das sogenannte *Lie-Trotter-Splitting* kennen gelernt. Dabei wird die Lösung eines Anfangswertproblems mit additiv zerlegter rechter Seite

$$\frac{\partial a}{\partial t} = f(a) + g(a), \quad a(0) = a_0 \quad (1)$$

approximiert. Angenommen  $\Phi_f^{\Delta t}$  liefert eine Lösung für die Gleichung  $\frac{\partial a}{\partial t} = f(a)$  und  $\Phi_f^{\Delta t}$  liefert eine Lösung für die Gleichung  $\frac{\partial a}{\partial t} = g(a)$ . Dann bestimmt man beim *Lie-Trotter-Verfahren* eine Näherungslösung von (1) durch

$$\Phi_{f+g}^{\Delta t} \approx \Phi_g^{\Delta t} \circ \Phi_f^{\Delta t}.$$

Zeigen Sie, dass das *Lie-Trotter-Splitting* die Konsistenzordnung 1 hat. Zeigen Sie dabei insbesondere, dass es nicht von Konsistenzordnung 2 ist.

**Aufgabe 2** ( $P_2$ – Lagrangebasis in 1D) (5 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Lagrangebasisfunktionen erster Ordnung für Finite Elemente Verfahren kennen gelernt. Dabei waren die stückweise linearen Basisfunktionen  $\varphi_i$  definiert durch  $\varphi_i(a_j) = \delta_{ij}$  für jeden Knoten  $a_j$  des Gitters. Zur Definition von Basisfunktionen höherer Ordnung werden weitere Stützstellen benötigt. Im Falle der Lagrangebasis zweiter Ordnung wählt man die Elementmittelpunkte und definiert erneut  $\varphi_i(a_j) = \delta_{ij}$ . Dabei sind die  $a_j$  jetzt alle Stützstellen, das heißt Elementecken und -mittelpunkte, siehe auch Abbildung 1.

- Bestimmen Sie die Basisfunktionen  $\hat{\varphi}_0, \hat{\varphi}_1$  und  $\hat{\varphi}_2$  der  $P_2$ – Basis auf dem Referenzelement  $\hat{E} = [0, 1]$ . Skizzieren Sie  $\hat{\varphi}_0, \hat{\varphi}_1$  und  $\hat{\varphi}_2$ .
- Bestimmen Sie die Transformation  $T_E : [0, 1] \rightarrow [a_{2i}, a_{2i+2}]$  des Referenzelements auf ein beliebiges Element und ihre Inverse  $T_E^{-1}$ .

- (c) Berechnen Sie die Einträge der sogenannten *lokale Steifigkeitsmatrix* für das Referenzelement

$$A_{kl} = \int_{\hat{E}} \hat{\varphi}'_{2i+k} \hat{\varphi}'_{2i+l} \, dx.$$

Nutzen Sie die Transformation und die Basisfunktionen auf dem Referenzelement um die Basisfunktionen  $\varphi_{2i}$ ,  $\varphi_{2i+1}$  und  $\varphi_{2i+2}$  auf dem beliebigen Element  $E = [a_{2i}, a_{2i+2}]$  darzustellen und berechnen Sie damit die lokale Steifigkeitsmatrix  $A_E$  für das Element  $E$ .

*Hinweis: Benutzen Sie A um  $A_E$  auszurechnen.*

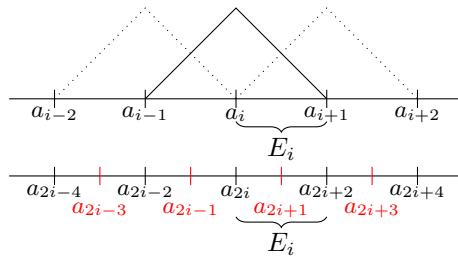


Abbildung 1:  $P_1$  – Basisfunktionen und zusätzliche Stützstellen für  $P_2$  – Basisfunktionen in 1D

**Aufgabe 3** (Turing-Modell, Computermodell mit Operator-Splitting) (7 Punkte)

Betrachten Sie das Reaktions-Diffusions-System

$$\begin{cases} \partial_t a = D_a \Delta a + g_1(a, b) \\ \partial_t b = D_b \Delta b + g_2(a, b) \end{cases} \quad \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^d \times [0, T] \quad (2a)$$

mit Neumann-Randbedingungen

$$\nabla a \cdot n = 0, \quad \nabla b \cdot n = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T] \quad (2b)$$

und Anfangsbedingungen

$$a(\cdot, 0) = a_0, \quad b(\cdot, 0) = b_0 \quad \text{in } \Omega, \quad (2c)$$

welches Sie in der Vorlesung als Turing-Modell kennengelernt haben. Um dieses zu simulieren wollen wir ein Computermodell für (2) herleiten. Dabei beschränken wir uns auf ein rechteckiges Gebiet  $\Omega = [0, L]^2 \subset \mathbb{R}^2$ , welches durch ein kartesisches Gitter<sup>1</sup> partitioniert ist.

- (a) Leiten Sie mit der Linienmethode und dem zellzentrierten Finite-Volumen-Verfahren eine Semidiskretisierung im Ort her. Beide Methoden sind aus der Vorlesung bekannt. Dort haben Sie darüber hinaus das Strang-Splitting kennengelernt. Verwenden Sie dieses, um den Diffusions- und den Reaktionsanteil in der Semidiskretisierung voneinander zu splitten.

<sup>1</sup>Ein kartesisches Gitter ist ein gleichmäßiges Gitter mit uniformer Kantenlänge, d.h. es besteht aus rechteckigen Zellen mit achsenparallelen Kanten, die alle gleich lang sind.

- (b) Diskretisieren wir die semidiskreten Probleme nun in der Zeit, erhalten wir ein Computermodell. Für das Diffusionsproblem wollen wir das explizite Euler-Verfahren verwenden und für das Reaktionsproblem das implizite Euler-Verfahren. Implementieren Sie das resultierende Computermodell in C++.
- Auf der Vorlesungshomepage finden Sie Code zur Generierung von Anfangswerten, zur Generierung von Gitterinformationen für Finite-Volumen-Verfahren auf kartesischen Gittern und für die Datenausgabe im VTK Dateiformat ( $\rightarrow$  **Paraview**).
  - Verwenden Sie die Implementierung des Theta-Verfahrens von Blatt 6. Wählen Sie dabei als Template-Parameter `VectorType`, `MatrixType` und `TimeType` geeignete Datentypen. Benutzen Sie als Gleichungssystemslöser für das implizite Euler-Verfahren die Implementierung des Newton-Verfahrens von Blatt 5.
  - Wählen Sie die Zeitschrittweite geeignet. Beachten Sie die CFL-Bedingung beim expliziten Euler-Verfahren, die eine Beschränkung der Zeitschrittweite mit sich bringt.

- (c) Verwenden Sie die Anfangswerte  $a_0$  und  $b_0$  aus dem zur Verfügung gestellten Code und testen Sie Ihre Implementierung an dem konkreten Modell

$$g_1(a, b) := 1/\varepsilon_0 (w_0(b) a + w_1(a) b - a^2), \quad w_0(b) := (1.0 - mb)/(1.0 - mb + \varepsilon_1), \\ g_2(a, b) := w_0(b) a - b, \quad w_1(a) := p(q - a)/(q + a),$$

$$\text{mit} \quad D_a = 1.0, \quad D_b = 10.0, \quad \varepsilon_0 = 2.2, \quad \varepsilon_1 = 0.02, \\ q = 0.0002, \quad p = 1.1, \quad m = 0.0007.$$

Dieses Modell beschreibt chemische Experimente für die Belousov-Zhabotinsky Reaktion, die in [Bánsági et al., 2011]<sup>2</sup> präsentiert werden. Die Experimente führen zu einer (eigentlich dreidimensionalen) Musterbildung, welche mit Hilfe eines Tomographen beobachtet werden kann.

Hinweise: Die Semidiskretisierung im Ort kann komponentenweise erfolgen. Durch das Splitting entkoppeln die beiden Komponenten des Diffusionsproblems. Die CFL-Bedingung beschränkt die maximale Zeitschrittweite in Abhängigkeit von beiden Komponenten des Diffusionsproblems.

---

<sup>2</sup>Bánsági, Tamás, Vladimir K. Vanag, and Irving R. Epstein. “Tomography of reaction-diffusion microemulsions reveals three-dimensional Turing patterns.” *Science* 331.6022 (2011): 1309-1312.