

---

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  $\Phi_g^{\Delta t}$  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.*

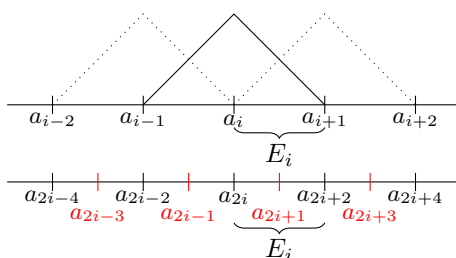


Abbildung 1:  $P_1$ -Basisfunktionen und zusätzliche Stützstellen für  $P_2$ -Basisfunktionen in 1D

### Aufgabe 3 (Turing-Modell, Computermodell mit Operator-Splitting)

(7 Punkte)

Betrachten Sie das Reaktions-Diffusions-System

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

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

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

$$g_2(a, b) := w_0(b) a - b, \quad w_1(a) := p(q - a)/(q + a),$$

mit

$$D_a = 1.0, \quad D_b = 10.0, \quad \varepsilon_0 = 2.2, \quad \varepsilon_1 = 0.02,$$

$$q = 0.0002, \quad p = 1.1, \quad m = 0.0007.$$

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.