

Übungsblatt 5

Differentialoperatoren

Aufgabe 1. Numerische Zeitableitungen

Gegeben ist eine streng monotone Folge diskreter Werte

$$t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_N = T.$$

Mit δt_i wird die Länge des Intervalls $[t_{i-1}, t_i]$ bezeichnet ($i = 1, \dots, N$).

- (a) Definieren Sie einen dimensionslosen Vektor $T = (t_0, t_1, \dots, t_N)^T$. Setzen Sie $t_0 = 0$ und $t_N = 1$. Die Zwischenwerte sind durch eine äquidistante Unterteilung definiert.
- (b) Im Folgenden soll die numerische Approximation der Ableitung folgender Funktionen bezüglich der dimensionslosen Variable t berechnet werden:

$$f_1(t) = \cos(100t), \quad f_2(t) = 5t^2 - 3t + 5, \quad f_3(t) = \exp(-5t).$$

Erstellen Sie hierfür zunächst Subroutinen $f1(t)$, $f2(t)$ und $f3(t)$ (d.h. die Dateien `f1.m`, ...) für die Berechnung der Funktionswerte. Zur Verifikation der numerischen Ergebnisse erstellen Sie bitte Funktionen $df1(t)$, $df2(t)$ und $df3(t)$, welche die exakten Ableitungen ausgeben. Beachten Sie, dass diese Routinen ebenfalls Vektoren als Eingabeparameter verarbeiten sollen. Dafür eignen sich die Operatoren

`.*`, `./`, `.^`, `...`

Diese agieren stets komponentenweise und weisen gegenüber Schleifen einen entscheidenden Geschwindigkeitsvorteil auf. Beispiel:

$$z = x .* y \iff z_i = x_i y_i \quad (i = 1, \dots, \text{length}(x))$$

- (c) Schreiben Sie drei Funktionen: (s. *Hinweise*)

`ForwardEuler(i, T, f),`

`BackwardEuler(i, T, f),`

`MidpointRule(i, T, f),`

die die Ableitung $f'(t_i)$ mit dem entsprechenden Schema approximieren. Der Parameter f ist hier Pointer auf eine (skalare) Funktion der "Zeit". Die entsprechende Definition entnehmen Sie bitte der Vorlage. Als Parameter i soll auch ein Vektor (eine Liste von Indizes $i = (i_j)$) als Eingabe möglich sein. Beachten Sie den Wertebereich der Indizes $(0, \dots, N)$. Berücksichtigen Sie, dass an den Rändern des Bereiches jeweils nur ein bestimmtes der drei vorgestellten Verfahren möglich ist. Implementieren Sie eine entsprechende Fallunterscheidung. Weitere Hinweise finden Sie in den Matlab Vorlagen.

- (d) Stellen Sie die numerischen Approximationen der verschiedenen Differentiationsschemata für $N \in \{10, 50, 100, 200, 300, 1000\}$ gemeinsam mit der *exakten* Ableitung für alle drei Funktion f_1 , f_2 und f_3 dar. Unterscheiden Sie die exakte und approximierte Lösung geeignet (Farbe, Linientyp o.ä.).

- (e) Wie viele Teilintervalle sind notwendig, um qualitativ die Ableitung von f_1 zu approximieren? Wie begründen Sie dies? Was folgt daraus für den Lösungsraum bei Verwendung numerischer Verfahren? Welches Frequenzspektrum kann gut, welches nur schlecht approximiert werden? Welche Folgerung lässt sich daraus für Werkstoffe mit feinskaliger Mikrostruktur schließen?
- (f) Welche Unterschiede gibt es zwischen den einzelnen Verfahren?
- (g) Welche Problematik ergibt sich für die Mittelpunkregel, wenn die Partitionierung nicht äquidistant ist? Leiten Sie eine Formulierung für die nicht-uniforme Diskretisierung aus folgendem Gleichungssystem her:

$$\begin{aligned}
 f(t_-) &\stackrel{\text{Taylor}}{=} f(t) - \underbrace{(t - t_-)}_{=\delta t_1} f'(t) + \frac{\delta t_1^2}{2} f''(t) - \dots \approx (1, -\delta t_1) (f(t), f'(t))^T, \\
 f(t_+) &\stackrel{\text{Taylor}}{=} f(t) + \underbrace{(t_+ - t)}_{=\delta t_2} f'(t) + \frac{\delta t_2^2}{2} f''(t) + \dots \approx (1, \delta t_2) (f(t), f'(t))^T, \\
 \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -\delta t_1 \\ 1 & \delta t_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(t) \\ f'(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} f(t_-) \\ f(t_+) \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Lösen Sie dieses Gleichungssystem nach $f'(t)$ als Funktion von $f(t_-)$ und $f(t_+)$. Passen Sie die Implementierung entsprechend an.

Aufgabe 2. Numerische Differentiation in Matrixform

Es soll nun anhand diskreter (gegebener) Funktionswerte f_i an den Stützstellen t_i die Ableitung $f'(t)$ auf dem Intervall $[t_0, T]$ numerisch berechnet werden. Dafür eignet sich eine Darstellung der in Aufgabe 1 verwendeten diskreten Differentialoperatoren in Matrixform. Gehen Sie dabei von einer äquidistanten Partitionierung mit Schrittweite $\delta t = \frac{T-t_0}{N}$ aus. Verwenden Sie eine dünnbesetzte Matrix (*sparse*). Beachten Sie die Zusatzhinweise aus der Übung und die bereitgestellten Beispiele.

- (a) Wie lautet die Systemmatrix A_{FW} bei Verwendung des Vorwärts-Euler-Verfahrens?
- (b) Wie lautet die Systemmatrix A_{BW} bei Verwendung des Rückwärts-Euler-Verfahrens?
- (c) Wie lautet die Systemmatrix A_{MP} bei Verwendung der Mittelpunkregel?
- (d) Berechnen Sie die Ableitung der Funktionen aus Aufgabe 1 mit den Matrizen A_{FW} , A_{BW} und A_{MP} . Definieren Sie hierfür einen Vektor f der diskreten Funktionswerte $f(t_i)$.

Anmerkung: An den Rändern ist der jeweils geeignete Algorithmus zu wählen.

Hinweise

Die numerischen Differentialoperatoren sind wie folgt definiert: (**konstante** Schrittweite δt)

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f^{\text{FW}}(t_i) &= \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{\delta t} && \text{Vorwärts-Euler,} \\ \frac{d}{dt}f^{\text{BW}}(t_i) &= \frac{f(t_i) - f(t_{i-1})}{\delta t} && \text{Rückwärts-Euler,} \\ \frac{d}{dt}f^{\text{MP}}(t_i) &= \frac{f(t_{i+1}) - f(t_{i-1})}{2\delta t} && \text{Mittelpunktregel.}\end{aligned}$$

Im Falle unzulässiger i ist automatisch der Wert eines anderen (zulässigen) Verfahrens zu wählen.

Hausaufgabe 1. Numerische Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung

Es wird eine Reaktorgleichung betrachtet werden, bei der die Temperaturentwicklung während einer exothermen, adiabat ablaufenden chemischen Reaktion untersucht wird. Gegeben ist folgende gewöhnliche Differentialgleichung für die Temperatur $\theta(t)$:

$$\varrho c \frac{d}{dt}\theta(t) = \dot{h}_0 \exp\left(\frac{-k}{\theta}\right).$$

Die Temperatur des Mediums zu Beginn der Reaktion beträgt $\theta_0 = 293\text{K}$. Mit ϱ wird die Massendichte, mit c die spezifische Wärmekapazität, mit \dot{h}_0 die maximale Energiefreisetzungsrate der Reaktion und mit k eine Reaktionskonstante bezeichnet. Die Gleichung beschreibt einen linearen Zusammenhang zwischen der exothermen Energiefreisetzung und der durch ein Arrheniusgesetz beschriebenen Reaktionskinetik. Die freigesetzte chemische Energie wird wegen der adiabaten Randbedingung vollständig in thermische Energie umgewandelt. Die Parameter sind in diesem Beispiel

$$\varrho = 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, \quad c = 1000 \frac{\text{J}}{\text{kg K}}, \quad \dot{h}_0 = 1.7 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{s m}^3}, \quad k = 561\text{K}.$$

- (a) Schreiben Sie ein Programm, das für ein äquidistant unterteiltes Zeitintervall $[t_0, T]$ (mit $t_0 = 0, T = 100$) mit Hilfe des *Vorwärts-Euler-Verfahrens* die diskreten Funktionswerte berechnet. Das Vorwärts-Eulerverfahren basiert auf

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(x(t), t) \approx \frac{x(t + \delta t) - x(t)}{\delta t} \implies x(t + \delta t) \approx x(t) + \delta t f(x(t), t).$$

Vergleichen Sie die Lösung bei Verwendung von 1, 5, 20, 100 und 500 Zeitschritten.

- (b) Die rechte Seite wird nun um eine äußere Kühlung $q_{\text{ab}} = 7.5 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{s m}^3}$ erweitert. Berechnen Sie den Verlauf der Temperatur erneut.

Hausaufgabe 2. Implizite Zeitintegration

Lösen Sie Aufgabe 3 nun mit Hilfe des Rückwärts-Euler-Verfahrens. Dafür gehen Sie von folgender Gleichung aus:

$$\frac{d}{dt}x(t + \delta t) = f(x(t + \delta t), t + \delta t) \approx \frac{x(t + \delta t) - x(t)}{\delta t}.$$

Daraus folgt

$$x(t + \delta t) = x(t) + \delta t f(x(t + \delta t), t + \delta t).$$

Diese Gleichung lässt sich für gewöhnlich *nicht* analytisch nach der unbekannten Größe (hier: $x(t + \delta t)$) auflösen. Es wird deshalb ein sogenanntes Prädiktor-Korrektor-Verfahren angewendet:

[A1] Expliziter Prädiktor

Setze $j = 0$, $x^{(0)}(t + \delta t) = x(t) + \delta t f(x(t), t + \delta t)$

[A2] Residuum prüfen

Berechne $r^{(j)} = x^{(j)} - x(t) - \delta t f(x^{(j)}, t + \delta t)$.

Falls $|r^{(j)}| < \varepsilon_{\text{TOL}}$: Setze $x(t + \delta t) = x^{(j)}$. Ende

[A3] Impliziter Korrektor

Berechne die Ableitung des Residuums bezüglich $x^{(j)}$:

$$\frac{dr^{(j)}}{dx^{(j)}} = 1 - \delta t D_x f(x^{(j)}, t + \delta t).$$

Die Linearisierung des Residuums wird gleich Null gesetzt und so δx bestimmt:

$$r^{(j+1)} \approx r^{(j)} + \frac{dr^{(j)}}{dx^{(j)}} \delta x = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta x = \frac{-r^{(j)}}{1 - \delta t D_x f(x^{(j)}, t + \delta t)}.$$

[A4] Setze $x^{(j+1)} = x^{(j)} + \delta x$, $j = j + 1$ und gehe zu **[A2]**.

Dipl.-Ing. Johannes Ruck

johannes.ruck@kit.edu

M.Sc. Hannes Erdle

hannes.erdle@kit.edu

Sprechstunde Do. 13:00-14:00 Uhr (Geb. 10.23, Raum 302.3)