

Zusammenfassung

In vielen Herstellungsprozessen werden heutzutage elektrochemische Verfahren eingesetzt. Diese Prozesse werden meist vorab durch eine Simulation optimiert, um den Verbrauch von Ressourcen zu minimieren. Hierzu wird das Multi-Ionen Transport und Reaktionsmodell (MITReM) eingesetzt. Das Modell ist ein nichtlineares System von partiellen Differenzialgleichungen (PDEs). Es wird durch eine kombinierte Residuen-Distribution Finite Elemente Methode diskretisiert und mit einem Newton Verfahren linearisiert, dies resultiert in einer Reihe von großen linearen Gleichungssystemen.

In dieser Arbeit wollen wir diese linearen Systeme durch ein punkt-basiertes algebraisches Mehrgitterverfahren (PAMG) lösen. Diese Art von Verfahren ist bekannt für ihre optimale Skalierbarkeit für eine Reihe von Problemklassen. Wir zeigen, dass standardmäßige PAMG Verfahren, die auftretenden linearen Systeme nicht zufriedenstellend lösen, weil physikalische Eigenschaften des MITReMs nur unzureichend berücksichtigt werden.

Wir entwickeln ein neues PAMG Verfahren, das physikalische Eigenschaften eines zugrunde liegenden PDE Systems explizit mit einbezieht. Das physikalisch-orientierte Verfahren löst die entstehenden Gleichungssysteme effizient und robust.

Das neue PAMG Verfahren berücksichtigt die physikalischen Eigenschaften sowohl in der Glättung als auch in der Grobgitter Korrektur. Das Glättungsverfahren verwendet eine auf physikalischen Eigenschaften basierende Permutation der Variablen, um bessere Ergebnisse zu erzielen. Die Permutation wird durch eine automatische Methodik bestimmt, die sowohl skalare PDEs als auch PDE Systeme umfasst und insbesondere Informationen über Richtungsfelder mit einbezieht.

Wir entwickeln eine heuristische Péclet Zahl, die es möglich macht numerische Schwierigkeiten auf groben Gittern zu lokalisieren. Diese Schwierigkeiten werden durch die verwendete Diskretisierung verursacht. Das vorgeschlagene Grobgitter Korrekturverfahren ermöglicht, diese Erkenntnisse in den Vergrößerungsprozess mit einzubeziehen.

Das neue physikalisch-orientierte PAMG Verfahren vergleichen wir mit standardmäßigen PAMG Verfahren an der Konvektions-Diffusionsgleichung, an einem Migrations-Diffusionssystem und an mehreren industriell relevanten Geometrien und elektrochemischen Systemen des MITReMs. Die Vergleiche zeigen, dass das neue Verfahren den standardmäßigen PAMG Verfahren in Effizienz und Robustheit überlegen ist.