

Modellreduktion für chemische Reaktionsgleichungen

Uwe Prüfert¹, Martin Ullmann², Christian Hasse², Oliver Ernst³

¹Institut für Numerische Mathematik und Optimierung

²Institut für Energieverfahrenstechnik und
Chemieingenieurwesen

³Technische Universität Chemnitz, Professur Numerische
Mathematik

Die numerische Simulation von Automobilkatalysatoren ist ein typisches Multiskalen/Multiphysik Problem, bei dem Teilmodelle in 1, 2, und 3 Ortsdimensionen miteinander gekoppelt werden, wobei die Größenordnungen im Bereich von 10^{-6} – 10^{-1} Metern liegen. Dies führt zu sehr komplexen Geometrien und damit großen Gleichungssystemen, die im Allgemeinen auch zusätzlich nichtlinear sind. Ein Teilmodell dabei sind die Gaskanäle, auf deren Rändern die katalytisch aktive Oberfläche aufgebracht ist. Diese ist wiederum mit Mikroporenstruktur versehen, in der die eigentlichen chemischen Prozesse ablaufen. Für die Berechnung der Gasströmung in den Gaskanälen wird ein Grenzschichtmodell benutzt. Für dessen numerische Lösung ist allerdings an jedem Randpunkt des Rechengebietes die Lösung eines weiteren, mehrdimensionalen, nichtlinearen Gleichungssystems nötig. Bei einer durchschnittlichen Anzahl von 2500 Randpunkten ist die effiziente Lösung dieser Gleichungen entscheidend für die Leistungsfähigkeit des gesamten Simulationswerkzeugs. Daher wurden Modellreduktionstechniken wie POD und DEIM speziell an das Problem chemischer Reaktionsgleichungen angepasst und implementiert.

Dabei konnte ihre grundsätzliche Eignung nachgewiesen werden. Dabei stellte sich die hochgradige Nichtlinearität des Problems als Hindernis für eine wesentliche Reduktion der Rechenzeit heraus. Hier besteht weiterer Forschungsbedarf, insbesondere bei der Kombination von POD/DEIM mit anderen Techniken.

Förderung: Haushalt/Virtuhcon