

1	Einleitung und Überblick zum vorliegenden Buch	1
1.1	Einleitung	1
1.1.1	Lösungsideen und algorithmische Motivation	2
	Literatur	10
2	Einleitung zum Fach: Berechnendes Ingenieurwesen (Computational Engineering)	13
2.1	Einleitung und Zusammenfassung	13
2.2	Computational Engineering	17
2.2.1	Computational Engineering im Bereich der numerischen Mathematik	19
2.2.2	Computational Engineering im Bereich der Informatik (Computer Sciences)	20
2.2.3	Computational Engineering im Bereich des Ingenieurwesens...	21
2.2.4	Computational Engineering im Bereich der Naturwissenschaften (Computational Sciences)	23
2.2.5	Computational Engineering und wissenschaftliches Rechnen	24
	Literatur	24
3	Modellierung: Transport- und Strömungsmodelle im Bereich der Multiskalenmodelle	27
3.1	Einleitung und Zusammenfassung	27
3.2	Transport- und Strömungsmodelle	31
3.3	Multiskalenmodelle: Überblick	33
3.3.1	Überblick: Multiskalenmodelle	33
3.3.2	Beispiel aus der Materialmodellierung (Skalen und Verfahren)	36
3.3.3	Einteilung der Multiskalenmodelle	37
3.4	Hydrodynamische Modellierung	39
3.5	Grundlagen im Bereich der Multiskalenmodellierung	44
3.5.1	Probleme bei Multiskalenmodellen	44
		XI

3.5.2	Problem der Steifheit bei Multiskalenmodellen	45
3.5.3	Beispiel: Steifheit bei Multiskalenmodellen	46
3.5.4	Verbesserter Löser für steife Verfahren: Implizite Verfahren	48
3.5.5	Beispiel einer Steifheit bei gewöhnlichen Differentialgleichungen	48
3.5.6	Grundwissen Multiskalenmodelle: Beispiele und Lösungen	49
3.5.7	Numerische Verfahren zur Lösung des Multiskalenproblems: Entkopplung der Skalen	51
3.6	Wirtschaftlichkeit und Modelldiskussion	52
3.6.1	Klassische Verfahren und moderne Verfahren	53
3.6.2	Softwarepakete	54
3.6.3	Fragen zum Verständnis des Kapitels	54
3.6.4	Übungsaufgabe: Steife Verfahren und deren Probleme	55
	Literatur	55
4	Theoretischer Überblick zu den numerischen Verfahren	57
4.1	Motivation: Lösung von Transport- und Strömungsmodellen	57
4.2	Lösen der Modellgleichungen (Überblick)	58
4.2.1	Klassifikation der Differentialgleichungen	59
4.2.2	Parabolische Differentialgleichung	61
4.2.3	Hyperbolische Differentialgleichung	63
4.3	Lösen der Modellgleichungen mit numerischen Verfahren	64
4.3.1	Numerische Verfahren zur Lösung von Transportgleichungen ...	67
4.4	Grundlagenaufgaben: Lösen der Transportgleichung	68
4.4.1	Herleitung der Konvektionsgleichung: Modellierung der Konvektionsgleichung	69
4.4.2	Einführung in die finiten Differenzenverfahren	70
4.4.3	Numerische Verfahren zur Lösung der Konvektionsgleichung ...	73
4.5	Modellierung der Diffusionsgleichung	78
4.5.1	Numerische Verfahren zur Lösung der Diffusionsgleichung	81
4.5.2	Umsetzen der Diffusionsgleichung in einen MATLAB® Algorithmus	83
4.6	Modellierung der Reaktionsgleichung	85
4.6.1	Zeitgesetz der Reaktionen	85
4.6.2	Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen	88
4.6.3	Globaler Diskretisierungsfehler und Konvergenz	96
4.6.4	Umsetzen der Reaktionsgleichung in einen MATLAB® Algorithmus	98
4.7	Grundlagenaufgaben: Strömungsgleichung	100
4.7.1	Burgers-Gleichung	101
4.7.2	Umsetzen der 1D-Burgers-Gleichung in einen MATLAB® Algorithmus	103

4.7.3	2D-Burgers-Gleichung.....	105
4.7.4	Splitting-Verfahren für die 2D-Burgers-Gleichung.....	107
4.7.5	Umsetzen der 2D-Burgers-Gleichung in einen MATLAB® Algorithmus	108
4.8	Navier-Stokes-Gleichung.....	111
4.8.1	Operator-Splitting-Verfahren für die Navier-Stokes-Gleichung ...	113
4.8.2	Druckkorrektur-Term	115
4.8.3	Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichung mit Staggered Grids	116
4.8.4	Diskretisierung der Raumoperatoren der Navier-Stokes-Gleichung	117
4.8.5	Lösung der Navier-Stokes-Gleichung mit Operator-Splitting-Verfahren	118
4.9	Numerische Verfahren im Bereich der nichtlinearen Gleichungen.....	119
4.9.1	Vergleich der Verfahren: Fixpunkt- und Newton-Verfahren	120
4.9.2	Robuste Verfahren	121
4.10	Exemplarische Anwendungen: Real-Life-Problemstellung	122
4.10.1	Problemstellung: Beschichtungsprozesse	123
4.11	Weitere Beispiele von Transportmodellen in technischen Anwendungen.....	126
4.12	Wirtschaftlichkeit und Softwarepakete	130
4.13	Programmieraufgaben zur den Grundlagenaufgaben (Transportgleichung und Strömungsgleichungen)	131
4.13.1	Reaktionsgleichung	131
4.14	Fragen zum vorliegenden Kapitel.....	132
	Literatur.....	132

5	Multiskalenverfahren zur effektiven Simulation von Transport- und Strömungsmodellen	137
5.1	Motivation: Multiskalenmodelle bei komplizierten Transport- und Strömungsproblemen	137
5.1.1	Einführung und Motivation.....	139
5.1.2	Warum komplexe Flüssigkeiten	142
5.1.3	Neue numerische Methoden zur Lösung von komplexen Flüssigkeiten	144
5.1.4	Anwendung des Multiskalenmodells bei der Kopplung von der Navier-Stokes-Gleichung und molekulardynamischen Gleichungen	145
5.1.5	Modellherausforderungen im Bereich der Multiskalenmodelle	149
5.2	Klassifizierung von Multiskalenmethoden	151
5.2.1	Multiskalenlöser für eine Modellhierarchie	151

5.3	Grundlagen der numerischen Herausforderung bei Multiskalenmodellen	154
5.3.1	Einteilung der Multiskalenprobleme in Typ A und B	156
5.3.2	Methodologische Einteilung der Multiskalenprobleme	159
5.3.3	Multiskalenalgorithmen: Klassische Ideen	160
5.3.4	Multiskalenalgorithmen: Moderne Ideen	161
5.3.5	Einführendes Beispiel: Zweiskalenproblem	163
5.4	Numerische Verfahren (HMM-, EFM- und MISM-Verfahren).....	165
5.4.1	Top-Down: Einbettung der Mikroskala	165
5.4.2	Bottom-Up: Einbettung der Makroskala	166
5.4.3	Vor- und Nachteile der Multiskalenmethoden	168
5.5	MISM (Multiscale Iterative Splitting Method).....	168
5.6	Anwendungsbeispiele	170
5.6.1	Erstes Testbeispiel: HMM und Homogenisierungsmethode für eine an parabolischer PDGL	170
5.6.2	Zweites Testbeispiel: Matrixproblem	175
5.6.3	Dynamische Probleme: Stochastische Differentialgleichung	178
5.7	Wirtschaftlichkeit, Softwarepakete und Fragen zum Kapitel	180
5.7.1	Softwarepakete	181
5.7.2	MATLAB®-Übung: Mehrskalenübung am Beispiel von SGDL	182
5.7.3	Übungsaufgabe: HMM-Verfahren.....	186
5.7.4	Fragen zum vorliegenden Kapitel	187
	Literatur.....	188
6	Ergänzung zu Multiskalenverfahren und reale Ingenieursanwendungen	193
6.1	Praxisnahe Kopplungsverfahren als Multiskalenmethoden.....	193
6.2	Zerlegungsverfahren als Multiskalenmethoden	194
6.2.1	Multiskalenverfahren als Multioperatoren-Splittingverfahren	197
6.3	Multiskalenmodelle im Bereich der Modularen-Modelle: Anwendung bei der Zellmodellierung (WCM: Whole Cell Model)	198
6.3.1	Überblick der modularen Splitting-Verfahren	202
6.4	Anwendungsbeispiel: Fokker-Planck-Gleichung mit Particle in Cell als Multiskalenmethode	209
6.4.1	Lösung der Fokker-Planck-Gleichung mittels Multiskalenmethode	211
6.4.2	Algorithmus zu Kopplung von PIC- und SDGLs-Anteil.....	212
6.4.3	Particle in Cell-Verfahren.....	213
6.5	Anwendungen im Bereich der komplexen Fluide: Modellierung und Lösungsverfahren	217
6.5.1	Problem des exponentiellen Wachstums und Repräsentation mit logarithmischer Formulierung	221

6.6	Anwendungen im Bereich der Magnetohydrodynamik	224
6.6.1	Magnetohydrodynamik (MHD)	224
6.6.2	Grundgleichungen der idealen MHD	225
6.6.3	Vom physikalischen Prinzip zu den Methoden: Anwendung im Bereich von MHD-Modellen	227
6.7	Eigene Softwareentwicklung: Programmentwicklung	227
6.7.1	Eigene Programmpakete im Bereich der Multiskalenlöser	229
6.7.2	Vom Modell zum Programmpaket: Beispiel anhand einer Konvektions-Diffusions-Reaktions-Gleichung	230
6.8	Fragen zum vorliegenden Kapitel	236
	Literatur	237
7	Ergänzung zu den numerischen Umsetzungen und zu weiteren realen Anwendungen	241
7.1	Raumsplitting und Parallelisierung	241
7.1.1	Verschieden Ansätze für Raumzerlegungsverfahren	242
7.1.2	Parallelisierung der Raumzerlegungsverfahren	249
7.2	Zeitparallelisierung: Parareal Algorithms	250
7.2.1	Diskussion und Herleitung des Parareal-Algorithmus	251
7.2.2	Parareal Algorithmus als Prediktor-Korrektor-Methode	253
7.3	Parallelisierung	255
7.3.1	Synchrone und asynchrone Methoden	257
7.3.2	Beispiel einer Parallelisierung: Jacobi-Verfahren	258
7.4	Von der Modellierung zum Programm	260
7.5	Kommerzielle Softwarepakete	264
7.5.1	Numerische Umsetzung in einem kommerziellen Software-Paket COMSOL am Beispiel einer Beschichtungssimulation	266
7.6	Beispiel einer Softwareentwicklung im akademischen Bereich	272
7.7	Zusammenfassung Multiskalenmodelle und Prüfungsfragen	277
7.7.1	Fragen zum Kapitel und zu der numerische Umsetzung und Softwarepakete	278
	Literatur	278
	Zusammenfassung	281
	Appendix	283
	Glossar (Nomenklatur)	285
	Sachverzeichnis	287