

Einführung: Numerik differential-algebraischer Gleichungen (DAE) mit Anwendungen

Angela Kunoth (mit Samuel Leweke)

Seminar zur Numerik im SS 2019, Universität zu Köln
16. Januar 2019

Ziel dieses Vortrags: Motivation der Thematik / Philosophie

- Präparative Chromatographie [S]
- Mathematisches Modell [S]
- Grundlagen differential-algebraischer Gleichungen [HW, KM, LMT]
- Numerische Verfahren für DAEs [HW, KM, LMT]

Verwendete Literatur (zusätzlich zu Originalarbeiten):

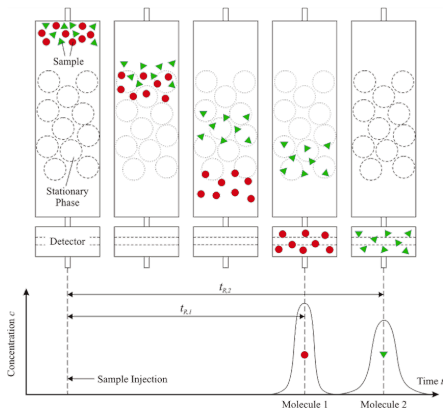
- [CADET] CADET — Chromatography Analysis and Design Toolkit, <https://www.github.com/modsim/CADET/>
- [HW] E. Hairer, G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations II, Springer, 2. überarbeitete Auflage, 1996.
- [KM] P. Kunkel, V. Mehrmann, Differential-Algebraic Equations, European Mathematical Society, 2006.
- [LMT] R. Lamour, R. März, C. Tischendorf, Differential-Algebraic Equations: A Projector Based Analysis, Springer, 2013.
- [S] H. Schmidt-Traub, M. Schulte, A. Seidel-Morgenstern (Hrsg.), Preparative Chromatography, Wiley-VCH Verlag, 2. Auflage 2012.

Chromatographie — Was ist das und wofür?

- ▶ Auftrennen einer Mischung von Molekülen
- ▶ Präparativer Kontext (Aufreinigung)
- ▶ Analytischer Kontext (Detektion & Identifikation)

Wo wird das eingesetzt?

- ▶ (Bio-)pharmazeutische Industrie (z. B. Insulin, Impfstoffe)
- ▶ Zuckerindustrie (Extraktion aus Zuckerrüben)
- ▶ Lebensmittelindustrie (Qualitätskontrolle)
- ▶ Forensik



S. Schnittert: CADET – Chromatography Analysis and Design Toolkit,
Vortrag in PhD Seminar, Nov. 2012, Jülich

Physikalische Effekte & Mechanismen

- ▶ Konvektion & Dispersion im Zwischenkornvolumen
- ▶ Diffusion in den Poren
- ▶ Adsorption & Desorption an den Oberflächen in den Poren

Mathematisches Modell

- ▶ Gekoppeltes System linearer partieller Differentialgleichungen 2. Ordnung
- ▶ Dominiert durch Konvektionsterm, kleiner Diffusionskoeffizient, Quellterm für Kopplung
- ▶ Bindungsmodell als nichtlineare algebraische Gleichung

Differential-algebraisches Gleichungssystem (DAE)

Räumliche Diskretisierung \leadsto semi-explizite DAE mit Index 1:

$$\begin{aligned} M(t)\dot{y} &= F(t, y, z) \\ 0 &= G(t, y, z) \end{aligned} \quad \text{mit} \quad y(0) = y_0, \dot{y}(0) = \dot{y}_0$$

t : Zeit, y : differentielle Zustände, z : algebraische Zustände

Ausgewählte Themen der Theorie

- (T1) Herleitung des mathematischen Modells der Chromatographie (2 Vorträge)
- (T2) Laplace-Transformation (2 Vorträge)
- (T3) Index-Konzepte von DAEs (2 Vorträge)
- (T4) Theoretische Grundlagen von DAEs (2 Vorträge)

Ausgewählte Themen der Numerik

- (N1) Ein- & Mehrschrittverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen (ODEs) (4 Vorträge)
- (N2) Ein- & Mehrschrittverfahren für DAEs (4 Vorträge)
- (N3) Konsistente Initialisierung der DAEs (2 Vorträge)
- (N4) Anwendung auf Chromatographie-Simulation (2 Vorträge)

Ziel und Sinn dieses Seminars

Eigenständig (mit Hilfestellung) vertiefende Themen bearbeiten und anderen darstellen:
wissenschaftliches Arbeiten lernen

Hier: Themen aus der Theorie und Anwendung numerischer Verfahren aus (**engl.**) Buchkapiteln, Originalarbeiten, Online-Dokumentationen und mit Hilfe bereitgestellter Programme in Matlab oder C/C++

Organisatorisches

- ▶ Verbindliche **Anmeldung** unter <http://www.numana.uni-koeln.de/17862.html> ab 25. Januar (00:00) bis spätestens 30. Januar (24:00) per E-Mail an leweke@math.uni-koeln.de mit ausgefüllter Maske (siehe Webseite)
- ▶ Festlegung der Themen und Vortragstermine bis zum 22. Februar 2019
- ▶ Literatur durcharbeiten und bis ins Detail verstehen; ggf. weitere Arbeiten/Literatur hinzuziehen; Material geeignet auswählen
- ▶ Formular zur Anmeldung zum Seminar (Webseite des Math. Inst.) bei Organisatoren abgeben (oder ins Postfach Kunothe bei Frau Georg)
- ▶ bis 2 Wochen vor Vortrag an leweke@math.uni-koeln.de erste Version der Folien (max. 15 Folienseiten) zur Durchsicht mailen
- ▶ Vortrag halten (max. 30 Minuten)
- ▶ bis max. 1 Monat nach dem Vortrag schriftliche Ausarbeitung zum Vortrag an BetreuerInnen; nach einmaliger Durchsicht von Organisatoren kann diese überarbeitet werden
- ▶ Note für Modul ergibt sich aus Vortrag, Inhalt/Gestaltung der Folien und schriftlicher Ausarbeitung in finaler Version