

# Ein modifiziertes Newtonverfahren mit selektiver Kopplung zur Lösung von hydrogeochemischen Mehrkomponentenmodellen

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten  
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
zur  
Erlangung des Doktorgrades



vorgelegt von  
Stephan Oßmann  
aus Lichtenfels

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen  
Fakultäten der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung:	28. Juli 2008
Vorsitzender der Promotionskommission:	Prof. Dr. E. Bänsch
Erstberichterstatter:	Prof. Dr. P. Knabner
Zweitberichterstatter:	PD Dr. M. Bause

Industriemathematik und Angewandte Mathematik

**Stephan Oßmann**

**Ein modifiziertes Newtonverfahren mit selektiver  
Kopplung zur Lösung von hydrogeochemischen  
Mehrkomponentenmodellen**

D 29 (Diss. Universität Erlangen-Nürnberg)

Shaker Verlag  
Aachen 2008

**Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Erlangen-Nürnberg, Univ., Diss., 2008

Copyright Shaker Verlag 2008

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-7484-9

ISSN 1615-6390

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • E-Mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Knabner für die Betreuung der Arbeit danken. Ein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Alexander Prechtel, dessen Bürotür stets offen stand und der mit zahlreichen Anregungen zum Gelingen dieser Arbeit beitrug. Des Weiteren danke ich Herrn Joachim Hoffmann für seine Hilfe bei der Einarbeitung in die Simulationssoftware *M++* und Herrn PD Dr. Markus Bause sowie Herrn Dr. Florin Radu, die mir vor allem zu Beginn der Promotionszeit hilfreich zur Seite standen.

Außerdem danke ich allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik I der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg für das hervorragende Arbeitsklima.

Erlangen, Mai 2008,  
Stephan Oßmann



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Angewandte Mehrkomponentenmodelle . . . . .	1
1.2	Aktueller Stand der Entwicklung . . . . .	2
1.3	Gliederung . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Modellgleichungen und Diskretisierung</b>	<b>5</b>
2.1	Modellierung . . . . .	5
2.1.1	Die Modellgleichungen . . . . .	5
2.1.2	Die Koeffizientenfunktionen . . . . .	7
2.1.3	Die Reaktionsterme . . . . .	7
2.2	Diskretisierung . . . . .	9
2.2.1	Variationsformulierung . . . . .	9
2.2.2	Aufstellen des Gleichungssystems . . . . .	10
2.2.3	Struktur der Jacobi-Matrix . . . . .	12
2.2.4	Kenngrößen . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Das modifizierte Newton-Verfahren</b>	<b>17</b>
3.1	Entkopplung im linearen Löser . . . . .	18
3.1.1	Entkoppelte lineare Gleichungssysteme . . . . .	18
3.1.2	Gewinn im linearen Löser . . . . .	19
3.1.3	Assemblierungsgewinn . . . . .	26
3.1.4	Der modifizierte Newtonlöser <i>NewtonBlock</i> . . . . .	28
3.2	Konvergenzverhalten . . . . .	31
3.2.1	Der lineare Fall . . . . .	31
3.2.2	Beispiele für den linearen Fall . . . . .	33
3.2.3	Der nichtlineare Fall . . . . .	34
3.2.4	Beispiel für den nichtlinearen Fall . . . . .	35
3.3	Vergleichssimulationen . . . . .	37
3.3.1	Ursprüngliche Schrittweite . . . . .	37
3.3.2	Simulationen mit veränderten Schrittweiten . . . . .	41
3.4	Das Broyden-Verfahren . . . . .	42
3.4.1	Beschreibung des Verfahrens . . . . .	43
3.4.2	Beispielsimulationen . . . . .	45

<b>4</b>	<b>Automatisierungen</b>	<b>47</b>
4.1	Zeitadaption . . . . .	47
4.1.1	Das Verfahren . . . . .	47
4.1.2	Beispielsimulationen . . . . .	48
4.2	Automatisierte Entkopplungsstrategien . . . . .	52
4.2.1	Reaktionsgraphen und deren Aufteilung . . . . .	52
4.2.2	Die Strategie . . . . .	53
4.2.3	Beispielsimulationen . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Praxisorientierte Simulationen</b>	<b>61</b>
5.1	Das EDTA-Problem . . . . .	61
5.1.1	Problembeschreibung . . . . .	62
5.1.2	Performance des Verfahrens . . . . .	64
5.2	Das Barriere-Problem . . . . .	68
5.2.1	Problembeschreibung . . . . .	68
5.2.2	Simulationsergebnisse . . . . .	72
5.2.3	Performance des Verfahrens . . . . .	75
<b>A</b>	<b>Implementierung</b>	<b>79</b>
A.1	Skript-File . . . . .	79
A.2	Das <i>SuperLU</i> -Verfahren . . . . .	83
A.3	Datenstrukturen . . . . .	84
A.4	Lösen der Teilsysteme . . . . .	84
A.5	Der Newtonlöser <i>NewtonBlock</i> . . . . .	86
A.6	Aufteilung des Reaktionsgraphen . . . . .	90
<b>B</b>	<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>95</b>
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>97</b>
	<b>Summary</b>	<b>101</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>105</b>
	<b>Curriculum Vitae</b>	<b>111</b>