

todos

Pascal Huber

July 22, 2014

Contents

- Note taken on *2014-07-22 Tue 17:11*

Aufgabenbeschreibung:

Im Zuge einer Software zur Ionen-Migration (Berechnung über die Poisson-Nernst-Planck Gleichung) soll ein script geschrieben werden, dass als Input Diffusionswerte, chemisches Potential und erwartete Fehler entgegennimmt und anschließend den elektrischen Fluß bestimmt. Dazu soll das Optimierungsprogramm DAKOTA (Design Analysis Kit for Optimization and Terascale Applications) von den SNL verwendet werden.

Meine Aufgabe ist es nun

1. Mache mich Dakota vertraut
 - Lese das gesamte Manual (Version 5.4).
 - Schaue, was für das obige Problem wichtig sein kann.

Poisson-Nernst-Planck Gleichung

$$\partial_t c = \nabla [D (\nabla c + \alpha \nabla \phi + \beta c \nabla \mu)]$$

$$\Delta \phi = \sum_i z_i c_i$$