
7 Numerische Verfahren

7.1 Einleitung

Neben den experimentellen und analytischen Methoden stehen dem Ingenieur in zunehmendem Maße Simulationsrechnungen als Werkzeug bei der Motorenentwicklung zur Verfügung. Dies ist durch die rasante Leistungssteigerung der Digitalrechner in den letzten beiden Dekaden und durch die hierdurch stimulierte Entwicklung genauer und schneller Algorithmen zur Lösung der mathematischen Grundgleichungen bedingt. Es existieren eine Reihe von Lösungsverfahren für inkompressible und kompressible Strömungen, die in der einschlägigen Literatur wie etwa in /1/, /2/, /3/, /4/, /5/, /6/, /7/ beschrieben werden. Damit ist für die numerischen Forschungsarbeiten eine sichere Basis vorhanden. Für selbst zu entwickelnde Programmpakete kann auf die in Lehrbüchern oder in Fachzeitschriften veröffentlichten Artikel über Lösungsverfahren zurückgegriffen werden, oder es können geeignete Programmpakete auf dem Softwaremarkt erworben werden. Vor diesem Hintergrund konzentrieren sich die numerischen Arbeiten auf die Ausarbeitung neuer mathematischer Modelle für spezielle physikalische Vorgänge, wie zum Beispiel für die Strahlbildung und den -zerfall bei Einspritzvorgängen. In besonderen Fällen jedoch müssen ganz neue Lösungsmethoden entwickelt werden. Alle diese Wege sind im Rahmen der in diesem Buch dokumentierten Forschungsarbeiten beschriftet worden.

Neben selbstgeschriebener Software, Ergebnisse solcher Untersuchungen sind in den Kapiteln 2 und 3 dokumentiert, wurden von den Aachener Forschergruppen folgende Programmpakete im Rahmen des SFB verwendet: SPICE, SPEED, KIVA II, Star-CD, FLUENT. Die Programmpakete wurden durch neue Teilmodelle zur Lösung spezifischer Aufgaben erheblich erweitert und für die Lösung besonderer Fragestellungen, wie die Berechnung des turbulenten Wärmeübergangs im Motor, Kapitel 2.2.3.1, und Strahlausbreitung, Zerstäubung und Verdampfung, Kapitel 4.2, oder Verbrennung im Dieselmotor, Kapitel 4.4.1.4, herangezogen. Die in diesen Computercodes implementierten Lösungsalgorithmen hier näher zu beschreiben, würde den Umfang des Buches sprengen. Für ein eingehendes Studium sei deshalb auf die in den genannten Kapiteln aufgeführte Literatur verwiesen. Stattdessen sollen hier in einem ersten Teil nur die Grundschriffe zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen der Strömungsmechanik - die Formulierung des diskreten Problems - kurz angerissen werden.

In einem zweiten Abschnitt, der das eigentliche Anliegen dieses Kapitels ist, sollen dann zwei neuentwickelte Verfahren detaillierter vorgestellt werden, deren Ausarbeitung nötig war, um die spezifischen Eigenschaften der Interaktion von Strömung und

Chemie bei der Ausbreitung laminarer und turbulenter Vormischflammen numerisch mit ausreichender Genauigkeit berechnen zu können. Diese Verfahren sind außer an dieser Stelle durch eine Reihe von Veröffentlichungen /8/, /9/, /10/, /11/, /12/, /13/, /14/ dokumentiert.

7.2 Erhaltungsgleichungen

Die mathematische Beschreibung der Transportvorgänge in inerten und reaktiven Strömungen führt auf Erhaltungsgleichungen für Vektorfelder. Die Änderung von physikalischen Größen in einem Gebiet t , zusammengefaßt im Vektor \vec{U} wird hervorgerufen durch konvektive und diffusive tensorielle Flüsse $\vec{H} = \vec{H}_{\text{conv}} + \vec{H}_{\text{diff}}$ über die Oberfläche des Gebietes und zum Beispiel durch Quellen und Senken im Inneren \vec{Q} des Gebietes. Die allgemeine mathematische Formulierung lautet mit dem nach außen gerichteten Vektor $d\vec{A}$ des Oberflächenelementes

$$\frac{\delta}{\delta t} \left(\int_{\tau} \vec{U} \cdot d\vec{t} \right) = - \oint_A \vec{H} \cdot d\vec{A} + \int_{\tau} \vec{Q} \cdot d\vec{t} \quad (7-1)$$

7.2.1 Konservative und nichtkonservative Form

Bei Anwendung des Erhaltungssatzes auf Strömungen reagierender Gase führt Gleichung (7-1) mit dem Vektor \vec{U} der konservativen Variablen und den konvektiven und diffusiven Flüssen auf

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{r} \cdot \vec{v} \\ \mathbf{r} \cdot E \\ \mathbf{r} \cdot Y_i \end{bmatrix}, \quad \vec{H} = \vec{H}_{\text{conv}} + \vec{H}_{\text{diff}} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \cdot \vec{v} \\ \mathbf{r} \cdot \vec{v} \cdot \vec{v} + p \cdot \vec{l} \\ \vec{v} \cdot (\mathbf{r} \cdot E + p) \\ \mathbf{r} \cdot \vec{v} \cdot Y_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \vec{t} \\ \vec{t} \cdot \vec{v} + \vec{q} \\ \vec{j}_i \end{bmatrix}, \quad \vec{Q} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ q_r \\ \dot{m}_i \end{bmatrix}. \quad (7-2)$$

Darin bezeichnen \mathbf{r} die Dichte, \vec{v} den Geschwindigkeitsvektor,

$\mathbf{r} \cdot E = \mathbf{r} \cdot e + \frac{\mathbf{r}}{2} \cdot v^2 + \mathbf{r} \cdot \sum_{i=1}^{n-1} Y_i \cdot [h_i^0 - h_n^0]$ die spezifische innere Totalenergie, p den

Druck sowie Y_i die Massenbrüche und h_i^0 die Bildungsenthalpien der Spezies i .

Der Vektor des Speziesdiffusionsstroms wird nach dem Fickschen Gesetz

$$\vec{j}_i = -\mathbf{r} \cdot D_i \cdot \nabla Y_i \quad (7-3)$$

bestimmt. In dieser Formulierung sind Thermodiffusionseffekte vernachlässigt und ein effektiver Diffusionskoeffizient D_i angenommen.

Der Wärmestrom q errechnet sich aus dem Fourierschen Gesetz, Wärmeleitkoeffizient k , und dem Enthalpietransport durch Diffusion zu

$$\vec{q} = -k \cdot \nabla T + \sum_{i=1}^n h_i \cdot \vec{j}_i \quad (7-4)$$

Für den chemischen Quellterm gilt

$$\dot{m}_i = W_i \cdot \sum_{k=1}^r \mathbf{n}_{ik} \cdot w_k \quad (7-5)$$

worin W_i die Molgewichte, $\mathbf{n}_{ik} = \mathbf{n}_{ik}'' - \mathbf{n}_{ik}'$ die stöchiometrischen Nettokoeffizienten (netto) von Spezies i in der Reaktion k mit der Reaktionsrate w_k bezeichnen.

Für Newtonsche Fluide werden die Schubspannungen als Funktion der Geschwindigkeitsgradienten

$$\vec{\tau} = -I \cdot \nabla \vec{v} - \mu \cdot (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) \quad (7-6)$$

formuliert, wobei μ den Viskositätskoeffizienten darstellt. Nach einer Hypothese von Stokes ist der zweite Koeffizient I mit dem Viskositätskoeffizienten durch $I = -2/3\mu$ verknüpft.

Unter der Annahme eines lokalen thermodynamischen Gleichgewichtes kann mit der Zustandsgleichung des idealen Gases

$$p = (g-1) \cdot \left[r \cdot E - \frac{r}{2} \cdot v^2 - \sum_{i=1}^{n-1} Y_i \cdot [h_i^0 - h_n^0] \right] \quad (7-7)$$

das Gleichungssystem geschlossen werden, wobei $g = c_p/c_v$ den Isentropenexponent bezeichnet.

Solange die durch Gleichung (7-1) beschriebenen Felder keine Diskontinuitäten ausbilden, lassen sich mit dem Satz von Gauß für die obigen Integralgleichungen mathe-

matisch äquivalente partielle Differentialgleichungen aufschreiben. Diese lauten für kartesische Koordinaten (x,y,z)

$$\vec{U}_t + \vec{E}_x + \vec{F}_y + \vec{G}_z = \vec{Q} \quad (7-8)$$

Beispielhaft steht der Term \vec{E} für

$$\vec{E} = \vec{E}_{\text{conv}} + \vec{E}_{\text{diff}} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \cdot \mathbf{u} \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{u}^2 + p \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{u} \cdot v \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{u} \cdot w \\ u \cdot (\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} + p) \\ u \cdot Y_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ t_{xx} \\ t_{xy} \\ t_{xz} \\ u \cdot t_{xx} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{t}_{xy} + w \cdot t_{xz} + q_x \\ j_x \end{bmatrix}. \quad (7-9)$$

In dieser Form korrespondieren die partiellen Differentialgleichungen (Gleichung (7-8)) mit der allgemeinen Schreibweise eines Erhaltungsgesetzes (Gleichung (7-1)); daher wird diese Form die konservative oder Divergenzform genannt.

Alternativ können die konvektiven Anteile der Vektoren E , F und G des Erhaltungsgesetzes (Gleichung (7-8)) in nichtkonservativer Form geschrieben werden, indem die Ortsdifferentiationen ausgeführt werden und die Kontinuitätsgleichung eingesetzt wird. Für die x-Komponente des Impulssatzes folgt dann zum Beispiel:

$$\mathbf{r} \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{r} \cdot u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \mathbf{r} \cdot v \cdot \frac{\partial u}{\partial y} + \mathbf{r} \cdot w \cdot \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial t_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial t_{xz}}{\partial z}. \quad (7-10)$$

Beide Formulierungen sind nicht äquivalent, da die nichtkonservative Formulierung sogenannte schwache Lösungen der Erhaltungsgleichungen, also solche die Diskontinuitäten wie Stöße und Vormischflammen enthalten, nicht einschließt.

7.2.2 Transformation auf krummlinige, zeitabhängige Koordinaten

Mehrdimensionale Probleme gehen oft einher mit geometrisch komplexeren Strömungsgebieten. Bei Motorinnenströmungen ist das Integrationsgebiet zusätzlich durch die Bewegung von Kolben und Ventilen zeitabhängig. Soll weiterhin die numerische Lösung der Erhaltungsgleichungen auf kartesischen Gittern erfolgen, so müssen gesonderte Formalismen für die Darstellung der Randbedingungen entworfen werden. Eine Alternative zu dieser Vorgehensweise stellt die Formulierung der Erhal-

tungsgleichungen auf nichtstrukturierten Netzen, die sich einer beliebigen Geometrie anzupassen vermögen oder auf konturangepaßten Koordinaten dar.

Im Rahmen der hier durchgeführten Arbeiten ist stets der zweite Weg beschritten worden. Dies erfordert eine Transformation der Erhaltungsgleichungen auf ein zeitabhängiges, krummliniges, nichtorthogonales Koordinatensystem, um den Aufwand bei der Formulierung der Randbedingungen in Grenzen zu halten. Der physikalische Raum wird über die Transformation:

$$\mathbf{t} = t, \mathbf{x} = \mathbf{x}(x, y, z, t), \mathbf{h} = \mathbf{h}(x, y, z, t), \mathbf{z} = \mathbf{z}(x, y, z, t) \quad (7-11)$$

auf einen rechteckigen, äquidistanten und zeitabhängigen Raum abgebildet. Mit dieser Vorschrift erhält man die transformierten Navier-Stokes-Gleichungen

$$\begin{aligned} & \left(\vec{U}_\tau + \mathbf{x}_t \cdot \vec{U}_\xi + \mathbf{h}_t \cdot \vec{U}_\eta + \mathbf{z}_t \cdot \vec{U}_\zeta \right) \\ & + \mathbf{x}_x \cdot \vec{E}_\xi + \mathbf{h}_x \cdot \vec{E}_\eta + \mathbf{z}_x \cdot \vec{E}_\zeta \\ & + \mathbf{x}_y \cdot \vec{F}_\xi + \mathbf{h}_y \cdot \vec{F}_\eta + \mathbf{z}_y \cdot \vec{F}_\zeta \\ & + \mathbf{x}_z \cdot \vec{G}_\xi + \mathbf{h}_z \cdot \vec{G}_\eta + \mathbf{z}_z \cdot \vec{G}_\zeta = \vec{Q} \end{aligned} \quad (7-12)$$

Diese nichtkonservative Form kann mit den Invarianten der Koordinatentransformation wieder in eine konservative Form überführt werden

$$\vec{U} t_\tau + \vec{E}_\xi + \vec{F}_\eta + \vec{G}_\zeta = \vec{Q}, \quad (7-13)$$

mit $\vec{U} = J \cdot \vec{U}$ und zum Beispiel $\vec{E} = J \cdot (\mathbf{x}_x \cdot \vec{E} + \mathbf{x}_y \cdot \vec{F} + \mathbf{x}_z \cdot \vec{G})$. Darin ist J die Funktionaldeterminante der Transformation

$$J = \det \begin{bmatrix} 1 & x_\tau & y_\tau & z_\tau \\ 0 & x_\xi & y_\xi & z_\xi \\ 0 & x_\eta & y_\eta & z_\eta \\ 0 & x_\zeta & y_\zeta & z_\zeta \end{bmatrix}. \quad (7-14)$$

Diese Divergenzformulierung in krummlinigen Koordinaten ist geeigneter Ausgangspunkt für die finite Differenzenformulierung der Erhaltungsgleichungen.

Vielfach ist jedoch zu beobachten, daß diese Form formal auf Strömungsprobleme mit zeitabhängigen Geometrien angesetzt wird, ohne zu berücksichtigen, daß zur Erhaltung der konservativen Form die zeitabhängige Invariante der Koordinatentransformation zu jedem Zeitpunkt erfüllt sein muß. Auf diese Problematik hat erstmals Thomas in /15/ hingewiesen. Er bezeichnete diese Invariante, die eine Transportgleichung für das Zellvolumen J darstellt, als Geometric Conservation Law

$$J_t + (J \cdot \mathbf{x}_t)_\xi + (J \cdot \mathbf{h}_t)_\eta + (J \cdot \zeta_t)_\zeta = 0 \quad (7-15)$$

In Arbeiten von Tamura und Fujii /16/ wird die Notwendigkeit aufgezeigt, das Zellvolumen als Erhaltungsgröße zu betrachten. In der numerischen Arbeit des Kapitels 2.1 wird Gleichung (7-15) als zusätzliche Erhaltungsgleichung analog zu den physikalischen Erhaltungsgleichungen gelöst.

7.2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Das Gleichungssystem (Gleichung (7-8) bzw. Gleichung (7-13) einschließlich Gleichung (7-15)) stellt ein Anfangswertproblem in der Zeit und ein Randwertproblem im Ortsraum dar. Daher werden zur Lösung sowohl Anfangs- als auch Randbedingungen benötigt, die problemabhängig zu formulieren sind und deshalb hier nicht angegeben werden sollen.

7.3 Diskrete Formulierung

Die numerische Lösung von partiellen Differential- oder Integralgleichungen erfordert folgende Schritte:

- die Definition des Gitters
- die Approximation der Differentiale bzw. Integrale durch algebraische Ausdrücke
- ein Verfahren zur numerischen Lösung der algebraischen Gleichungssysteme

Die folgenden Abschnitte sollen zu diesen Themen einen kurzen Überblick bieten.

7.3.1 Gitter

Für alle numerischen Lösungsverfahren, die im physikalischen Raum operieren, muß das Integrationsgebiet, über dem die Lösung definiert ist, diskretisiert werden. Für die abhängigen Variablen bedeutet dies, daß diese nur auf den durch die Diskretisierung definierten Stützstellen bekannt sind, deren Verteilung im physikalischen Raum das Gitter bzw. das Kontrollvolumen für die Flußbilanzierung definiert. Dabei werden Verfahren danach unterschieden, wo die abhängigen Variablen relativ zur Bilanzzelle

gespeichert sind: „zellzentriert“ oder „eckenzentriert“. Inkompressible Lösungsverfahren /3/ verwenden oft eine Mischform, um die Entkopplung von Druck- und Geschwindigkeitsfeld zu vermeiden („staggered grids“). Wegen der Robustheit des Verfahrens bauen viele kommerzielle Programmpakete auch zur Berechnung kompressibler Strömungen, wie KIVA II, FLUENT, auf solche Gitter auf. Die verschiedenen Formulierungen haben Einfluß auf den Abbruchfehler des numerischen Verfahrens (siehe auch Kapitel 7.2.2). Bei Verwendung nichtorthogonaler, krummliniger Koordinaten und einer formalen Genauigkeit der diskreten Formulierung von zweiter Ordnung auf orthogonalen, äquidistanten Gittern ist lediglich eine Genauigkeit von erster Ordnung erreichbar, da die Koeffizienten des nächst höheren Terms der Taylorentwicklung nicht mehr exakt verschwinden /17/. Eine vergleichsweise genaue Approximation stellt zum Beispiel das Cell-Vertex-Schema nach Hall /18/ dar.

7.3.2 Finite-Volumen-Verfahren

Finite Differenzen zur Approximation der Differentiale bauen unmittelbar auf der Definition der Ableitung auf. Die Ableitung einer Funktion u am Punkt x ist durch

$$u_x = \frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (7-16)$$

definiert. Falls Δx endlich bleibt, ist der Bruch auf der rechten Seite eine mit abnehmendem Δx besser werdende Approximation zum exakten Wert der Ableitung u_x . Die Differenz zwischen exakter Ableitung und ihrer Approximation wird Abbruchfehler genannt, dessen Ordnung die Güte der Approximation bestimmt. Sie läßt sich durch Einsetzen der Taylorentwicklungen für $u(x+\Delta x)$ in die Differenzenformel und Vergleich mit der linken Seite von Gleichung (7-16) ermitteln (Konsistenznachweis). Insbesondere müssen die verwendeten Gitter ein hohes Maß an Regularität aufweisen, um den Abbruchfehler klein zu halten. Eine solche Formulierung ist deshalb auf unstrukturierten Netzen nicht anwendbar. Moderne Algorithmen gehen eher von einer finiten Volumenapproximation der Erhaltungsgleichungen (Gleichung (7-1)), die unmittelbar diskret formuliert wird, indem das Integral als diskretes Kontrollvolumen aufgefaßt und die Bilanz für jede Gitterzelle des Integrationsgebietes formuliert wird. Eine solche Vorgehensweise läßt beliebigen Spielraum für die Anordnung der Kontrollzellen im Integrationsgebiet. Das Ergebnis einer finiten Volumenapproximation der Erhaltungsgleichungen stimmt mit der Differenzenapproximation überein, wenn die Differenzenapproximation auf die differentielle Formulierung des Erhaltungssatzes in konservativen Variablen angewandt wird.

Die Finite-Volumen-Methode ist Grundlage der diskreten Formulierung aller hier verwendeten Näherungslösungen der Differentialgleichungen. Eine ausführliche Darstellung zu diesem Gebiet findet sich in /6/.

7.3.3 Zeitliche Integration und Operator-Splitting

Mit den in den beiden vorgehenden Abschnitten skizzierten Vorgehensweisen sind die beiden Terme auf der rechten Seite von Gleichung (7-1) diskret formuliert. Die Berechnung der zeitlichen Evolution der Erhaltungsgrößen führt auf eigene Techniken. Ausgangspunkt ist zunächst eine Splitting-Technik, die näher erläutert werden soll.

Die Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik bilanzieren verschiedene physikalische Vorgänge wie Konvektion, Diffusion, Quellen mit völlig unterschiedlichem mathematischen Charakter. So stellen die reibungsfreien instationären und kompressiblen Eulergleichungen ein System nichtlinearer, gekoppelter Differentialgleichungen vom hyperbolischen Typ dar, wogegen z.B. die Diffusionsterme der Navier Stokes Gleichungen elliptischen Charakter haben. Eine fortgeschrittene numerische Methodik berücksichtigt den unterschiedlichen Charakter dieser Operatoren durch jeweils optimal angepaßte Algorithmen.

Die unterschiedlichen Integrationsmethoden zwingen daher die zeitliche Entwicklung des Strömungsfeldes als überlagerten Effekt der Einzelprozesse (Operatoren) darzustellen. Diese Zerlegung wird als Operator-Splitting bezeichnet.

Dies sei anhand der reaktiven Eulergleichungen in zwei Dimensionen

$$\vec{U}_t + \vec{E}_x + \vec{F}_y = \vec{Q} \quad (7-17)$$

erläutert. Es wird eine Aufspaltung in die richtungsabhängigen räumlichen Operatoren L_x und L_y und den Operator des Quellterms L_q vorgenommen

$$\begin{aligned} L_x: \vec{U}_t + \vec{E}_x &= 0 \\ L_y: \vec{U}_t + \vec{F}_y &= 0 \\ L_q: \vec{U}_t &= \vec{Q} \quad , \end{aligned} \quad (7-18)$$

die den unterschiedlichen Eigenschaften des Quellterms und der hyperbolischen Operatoren Rechnung trägt und zusätzlich berücksichtigt, daß bisher keine zufrieden-

stellende Lösungsmethode für mehrdimensionale hyperbolische Differentialgleichungen entwickelt werden konnte.

Die Lösung der Eulergleichungen in x -Richtung zum Beispiel wird dann zum Zeitpunkt $t+\Delta t$ mit der diskreten Approximation $\hat{L}_x(\Delta t)$ des Operators L_x aus

$$\vec{U}(t+\Delta t) = \hat{L}_x(\Delta t) \cdot \vec{U}(t) \quad (7-19)$$

berechnet. Mehrere Operatoren erfordern deren Hintereinanderschalten

$$\vec{U}(t+\Delta t) = \hat{L}_y(\Delta t) \cdot \vec{U}(t) + \hat{L}_x(\Delta t) \cdot \vec{U}(t) + \hat{L}_q(\Delta t) \cdot \vec{U}(t). \quad (7-20)$$

und ein Zwischenspeichern der Teilergebnisse $\hat{L}(\Delta t)$ sowie nachträgliches Summieren. Der zusätzliche Speicherbedarf kann vermieden werden, wenn die Operatoren als Sequenz angewandt werden

$$\vec{U}(t+\Delta t) = (\hat{L}_y(\Delta t) \cdot \hat{L}_x(\Delta t) \cdot \hat{L}_q(\Delta t) \cdot \vec{U}(t)) \cdot \vec{U}(t), \quad (7-21)$$

wobei jedoch offensichtlich das Endergebnis von der Reihenfolge der Anwendung der Operatoren abhängig ist. Die numerische Approximation ist in diesem Fall nur von erster Ordnung, unabhängig ob die Einzeloperatoren mit höherer Genauigkeit arbeiten.

Eine Splitting-Methode, die ohne zusätzlichen Speicherplatzbedarf die Genauigkeit zweiter Ordnung eines numerischen Integrationsverfahrens erhält, falls die Einzeloperatoren mindestens mit zweiter Ordnung Genauigkeit formuliert werden, ist das Splitting nach Strang /19/. Es ermöglicht die Lösung des komplexen Gesamtproblems durch geeignete, geschachtelte Abarbeitung der Teilprobleme in der Sequenz

$$\vec{U}(t+\Delta t) = \left(\hat{L}_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \cdot \hat{L}_y\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \cdot \hat{L}_q(\Delta t) \cdot \hat{L}_y\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \cdot \hat{L}_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \right) \cdot \vec{U}(t) \quad (7-22)$$

Sowohl die kommerziellen Codes, die im Rahmen von Teilprojekten verwendet werden, als auch die Eigenentwicklungen an den verschiedenen Instituten bedienen sich einer der obigen Formen des Operator-Splittings.

7.3.4 Stoßauflösende Verfahren

Diskretisierung

Bei der Konstruktion von numerischen Verfahren für die Eulergleichungen muß beachtet werden, daß wegen der Nichtlinearität der Konvektionsterme diskontinuierliche Lösungen möglich sind. Soll mit Hilfe eines numerischen Verfahrens die Bewegung der Diskontinuitäten richtig wiedergegeben werden, ohne diese Bewegung gesondert im Algorithmus zu betrachten (Shock-Capturing-Verfahren), so müssen zumindest die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Diskontinuität korrekt wiedergegeben, und unphysikalische Oszillationen in der Nähe der Diskontinuität vermieden werden.

Das Näherungsverfahren

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left[\vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2} - \vec{F}_{i-1/2}^{n+1/2} \right] \quad (7-23)$$

für Gleichung (7-18) bzw. Gleichung (7-19) heißt explizites Verfahren in Erhaltungform und kommt einer diskreten Integralform der Eulergleichungen, wie sie in Abbildung 7.1 dargestellt ist, gleich.

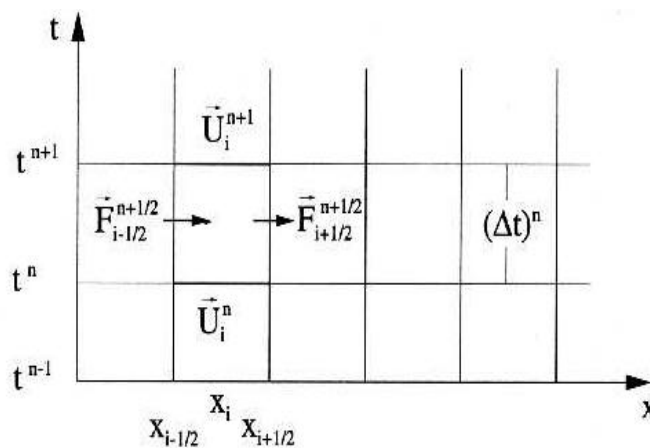


Abbildung 7.1 Diskretisierung der 1-D Eulergleichungen in Raum und Zeit

Hier sind

$$\vec{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \vec{U}(t^n, x) dx \quad \text{und} \quad \vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{\Delta x} \cdot \int_{t^n}^{t^{n+1}} \vec{E}(t, x_{i+1/2}) dt \quad (7-24)$$

numerische Approximationen der Mittelwerte der Erhaltungsgrößen \vec{U} und der Flüsse \vec{E} in x -Richtung auf den Rändern des raumzeitlichen Gebietes

$[t^n, t^{n+1}] \times [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ mit dem Zeitschritt Δt und der Zellgröße der Raumdiskretisierung $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$. Zu jedem Zeitpunkt t^{n+1} wird der im Zellzentrum x_i definierte neue Zellmittelwert \vec{U}_i^{n+1} aus der Kenntnis des alten Wertes \vec{U}_i^n und den bei $t^{n+1/2}$ zeitlich gemittelten Flüssen $\vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2}$ berechnet, die in führender Ordnung nur die Näherungswerte von zwei Nachbarwerten $\vec{F}_{i+1/2}^n = \vec{F}(\vec{U}_i^n, \vec{U}_{i+1}^n)$ berücksichtigen. Eine grundlegende Voraussetzung für Konvergenz des Näherungsverfahrens ist die Konsistenz des numerischen Flusses, die besagt, daß der numerische Fluß $\vec{F}(\vec{U}, \vec{U})$ in den physikalischen Fluß $\vec{f}(\vec{U})$ übergeht.

Aus der durch Gleichung (7-23) gegebenen konservativen Diskretisierung der Erhaltungsgleichungen und der zusätzlichen Einhaltung der Konsistenzbedingung folgt nach /20/, daß die Rankine-Hugoniot-Bedingungen für die Näherungslösung erfüllt sind und die Diskontinuität sich mit der exakten Ausbreitungsgeschwindigkeit bewegt.

Um ferner nur die physikalisch relevanten Lösungen zu approximieren, muß neben der Erhaltungsform noch eine diskrete Entropiebedingung erfüllt sein.

Die Vermeidung von Oszillationen in der Nähe großer Gradienten der Zustandsvariablen erfordert hingegen eine geeignete Auswertung der Flußmittelwerte. Klassische zentrale Differenzenverfahren für $\vec{F}_{i+1/2}^n = \vec{F}(\vec{U}_i^n, \vec{U}_{i+1}^n)$ wie z.B. das Zwei-Schritt-Lax-Wendroff-Verfahren /20/ weisen Oszillationen an Diskontinuitäten auf, die durch problemabhängig anzupassende künstliche Dämpfungsterme beseitigt werden müssen /1/.

Bei modernen Shock-Capturing-Verfahren (Godunov-Typ-Verfahren) resultieren die Dämpfungseigenschaften aus den Welleneigenschaften der hyperbolischen Gleichungssysteme (siehe /21/, /22/, /23/). Die grundlegende Idee der Godunov-Typ-Verfahren geht auf Godunov /24/ zurück. Er benutzte das Riemann-Problem, dessen inhärent nichtlineare Lösungsstruktur aus Verdichtungsstößen, Expansionsfächern und Kontaktunstetigkeiten aufgebaut ist, als einen Baustein für sein numerisches Verfahren. Danach wird der numerische Flußmittelwert $\vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2}$ aus der Lösung des Riemann-Problems der Gasdynamik in Abbildung 7-3 (links) mit konstanten Nachbarzuständen an der Zellgrenze $x_{i+1/2}$

$$\vec{U}_t + \vec{E}_x = 0, \quad \vec{U}(x, 0) = \begin{cases} \vec{U}_i^n & (x < x_{i+1/2}) \\ \vec{U}_{i+1}^n & (x > x_{i+1/2}) \end{cases} \quad (7-25)$$

bestimmt zu

$$\vec{F}_{i+1/2}^{n+1/2} = \vec{E}(\vec{u} \cdot (x_{i+1/2}, (\Delta t)/2)) \quad (7-26)$$

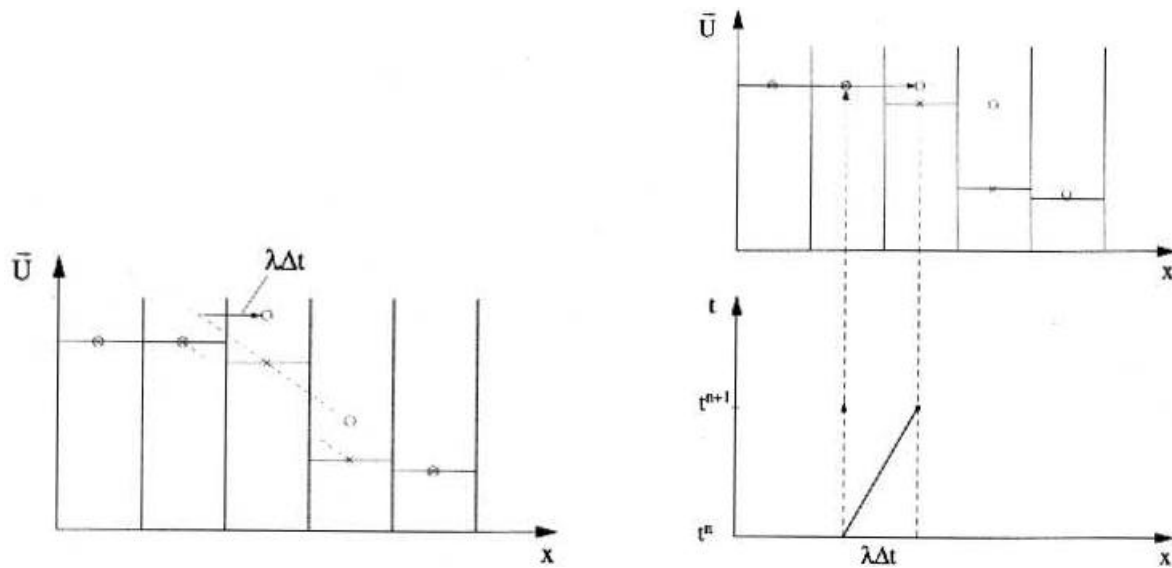


Abbildung 7-2 Zentrale und upwind Diskretisierung

Der numerische Fluß erfährt sämtliche sprunghafte Änderungen aufgrund der Wellenausbreitung und bezieht Informationen aus der charakteristischen Richtung (upwind-biased Verfahren).

Die typische numerische Darstellung einer Diskontinuität ist dann ein monotonies Profil, wie es in Abbildung 7-2 (rechts) anhand der numerischen Lösung einer Stoßwelle dargestellt ist. Es entstehen keine neuen, unphysikalischen Extremwerte, jedoch führt die Monotonisierung des Zustandsverlaufs aufgrund der eingebrachten numerischen Diffusion zu einer Verschmierung des ursprünglich scharfen Profils über zwei bis vier Gitterpunkte.

Einer linearen Stabilitätsanalyse folgend, unterliegen die so konstruierten expliziten Verfahren einer Zeitschrittbeschränkung, der CFL-Bedingung

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{|I|_{\max}} \quad . \quad (7-27)$$

Sie besagt, daß die Welle mit der betragsgrößten Ausbreitungsgeschwindigkeit I_{\max} in einem Zeitschritt Δt nicht so weit propagieren darf, daß die Flußberechnungen aus benachbarten Riemann-Problemen jeweils voneinander abhängig sind; daher kann maximal $c = 1$ erlaubt werden.

Numerische Flüsse

Die Nachteile des Verfahrens von Godunov sind die Genauigkeit von nur erster Ordnung und die Schwierigkeit, das nichtlineare Riemann-Problem exakt zu lösen. Die exakte Lösung des Riemann-Problems erfordert eine iterative Prozedur, welche zu einem relativ aufwendigen und komplizierten numerischen Verfahren führt.

Godunov-Typ-Verfahren, wie z.B. von Roe /25/, von Harten, Lax und van Leer /21/ oder von Harten, Lax und van Leer mit der Modifikation nach Einfeldt /22/, verwenden anstelle der exakten Lösung des Riemann-Problems nur eine approximative nicht-iterative Lösung (Riemann-Löser). Effiziente Riemann-Löser sind z.B. in /22/ und /25/ beschrieben.

Das in dieser Arbeit benutzte Verfahren beruht auf dem approximativen Riemann-Löser von Roe /25/. Es gehört zu der Gruppe der Flux-difference-splitting-Verfahren und zerlegt die Flußdifferenz zwischen den Anfangszuständen des Riemann-Problems in einzelne Wellen (Abbildung 7-3).

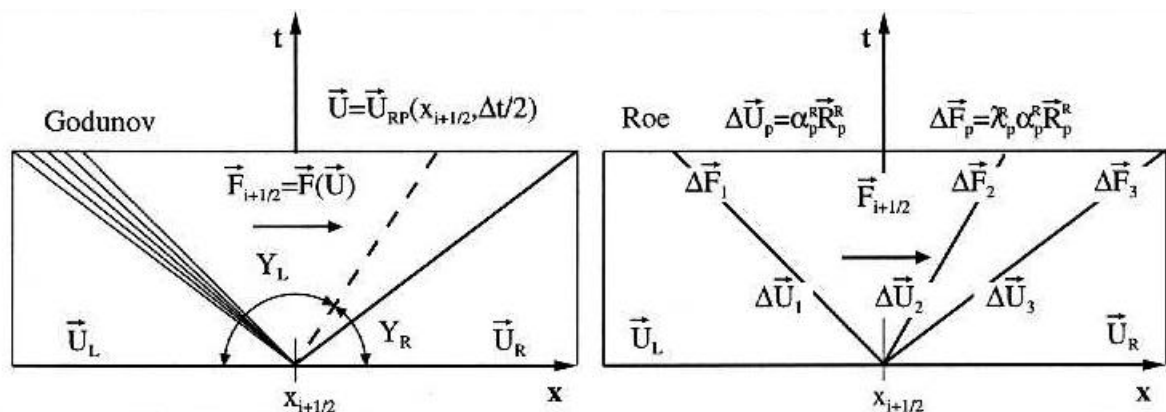


Abbildung 7-3 Flußberechnung beim Verfahren von Godunov und von Roe

Approximativer Riemann-Löser nach Roe

Bei diesem Verfahren wird das linearisierte Problem

$$\vec{U}_t + A(\vec{U}_{i+1/2}^R) \cdot \vec{U}_x = 0 \quad (7-28)$$

exakt nach der Charakteristikenmethode gelöst. Die Gleichungen der Charakteristikenmethode gelten mit der Matrix A , die konsistent ist mit der Jakobischen Matrix, ausgewertet in einem speziell gemittelten Zustand $\vec{U}_{i+1/2}^R$, der von den Nachbarzuständen $\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1/2}$ abhängt

$$\vec{U}_{i+1/2}^R = \vec{U}_{i+1/2}^R(\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}). \quad (7-29)$$

Der gemittelte Zustand $\vec{U}_{i+1/2}^R$ ist derart gewählt, daß die Rankine-Hugoniot-Bedingungen zwischen den Nachbarzuständen

$$A(\vec{U}_{i+1/2}^R) \cdot (\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_i) = \vec{F}_{i+1} - \vec{F}_i \quad (7-30)$$

erfüllt sind und somit eine eindeutige Lösung über Diskontinuitäten gewährleistet ist. Das nichtlineare Riemann-Problem wird für einzelne stationäre Diskontinuitäten (Stoßwelle oder Kontaktunstetigkeit) somit exakt gelöst. Durch die Erfüllung der Konsistenz der Matrix A folgen die reellen Eigenvektoren und die Wellengeschwindigkeiten. Aufgrund der obigen Eigenschaften gelten die allgemeinen Beziehungen:

$$\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_i = \sum_p (\mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R)_{i+1/2} \quad , \quad (7-31)$$

$$\vec{F}_{i+1} - \vec{F}_i = \sum_p (\mathbf{I}_p^R \cdot \mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R)_{i+1/2} \quad , \quad (7-32)$$

wobei \mathbf{a}_p^R die Amplitude, \mathbf{I}_p^R die Wellengeschwindigkeit und \vec{R}_p^R der Rechtseigenvektor der p -ten Welle, ausgewertet im mittleren Zustand $\vec{U}_{i+1/2}^R$, sind. Die Flußdifferenz $\vec{F}_{i+1} - \vec{F}_i$ wird in die Flußdifferenzen $\Delta \vec{F}_p$ über den einzelnen Wellen (Abbildung 7-3 rechts) aufgespalten. Für den Flußvektor auf der Zellgrenze ergeben sich nach dem Vorzeichen der Wellengeschwindigkeit die äquivalenten Beziehungen

$$\vec{F}_{i+1/2}(\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}) = \vec{F}_i + \sum_{\lambda_p^R < 0} (\mathbf{I}_p^R \cdot \mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R)_{i+1/2} \quad , \quad (7-33)$$

$$\vec{F}_{i+1/2}(\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}) = \vec{F}_{i+1} - \sum_{\lambda_p^R > 0} (\mathbf{I}_p^R \cdot \mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R)_{i+1/2} \quad . \quad (7-34)$$

Roe benutzt den Mittelwert und formuliert den numerischen Fluß erster Ordnung zu

$$\vec{F}_{i+1/2}^{\text{Roe}} = \vec{F}_{i+1/2}(\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}) = \frac{1}{2} \cdot \left[\vec{F}_i + \vec{F}_{i+1} - \sum_p (|\mathbf{I}_p^R| \cdot \mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R)_{i+1/2} \right] \quad . \quad (7-35)$$

Zur Einhaltung der diskreten Entropiebedingung muß die Ausbreitungsgeschwindigkeit I an sonischen Punkten in den Expansionsfächern $u \pm c = 0$ derart modifiziert werden, daß $|I| > 0$ ist. Die detaillierte Beschreibung dieses sogenannten Entropie-Fixes findet man z.B. in /26/.

Der Vektor der Wellenamplituden $\vec{a}_{i+1/2}$ ergibt sich aus

$$\vec{a}_{i+1/2} = R_{i+1/2}^{-1} \cdot [\vec{U}_{i+1} - \vec{U}_i]. \quad (7-36)$$

Die Rechtseigenvektoren und die Eigenwerte müssen in einem gemittelten Zustand $\vec{U}_{i+1/2}^R$, dem Roe-Mittel, das speziellen mathematischen Bedingungen genügen muß /25/, ausgewertet werden.

Fluß-und Steigungslimitierung

Das bisher beschriebene Verfahren nach Roe hat eine Genauigkeit von erster Ordnung. Dagegen besitzt das Lax-Wendroff-Verfahren einen Fluß zweiter Genauigkeitsordnung

$$\vec{F}_{i+1/2}(\vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}) = \frac{1}{2} \cdot \left[\vec{F}_i + \vec{F}_{i+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \sum_p \left([I_p^R]^2 \cdot \mathbf{a}_p^R \cdot \vec{R}_p^R \right)_{i+1/2} \right]. \quad (7-37)$$

Berechnungen mit diesem Verfahren weisen jedoch in der Nähe von Stößen unphysikalische Oszillationen auf. Um die Vorzüge des Lax-Wendroff-Verfahrens und die oszillationsfreie Erfassung von Diskontinuitäten durch die Flußformulierung erster Ordnung zu nutzen, wählt man eine Kombination aus beiden, die in glatten Gebieten in den Lax-Wendroff-Fluß $\vec{F}_{i+1/2}^{LW}$ und an Diskontinuitäten in den Roe-Fluß $\vec{F}_{i+1/2}^{Roe}$ übergeht. In einer Fluß-Limiter-Methode schreibt man den Fluß als Fluß erster Ordnung mit einem limitierten Korrekturterm

$$\vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_{i+1/2}^{Roe} + \mathbf{F} \cdot \left[\vec{F}_{i+1/2}^{LW} - \vec{F}_{i+1/2}^{Roe} \right], \quad (7-38)$$

wobei

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(\vec{U}_{i-1}, \vec{U}_i, \vec{U}_{i+1}, \vec{U}_{i+2}) \quad (7-39)$$

eine Limitierungsfunktion ist. In glatten Gebieten sollte sie nahe 1 sein und an Diskontinuitäten nahe dem Wert 0. In der Anwendung werden oft auch größere Wertebereiche von \mathbf{F} zugelassen. Eine Klasse von Fluß-Limiter-Methoden für skalare Erhaltungssätze wurde von Sweby /27/ untersucht. Algebraische Kriterien für die Limitierungsfunktion werden derart angegeben, daß die zweite Genauigkeitsordnung und die TVD-Eigenschaft erfüllt sind. Das Konzept der *Total-Variation-Diminishing* Verfahren (TVD) wurde von Harten /28/ eingeführt und besagt für skalare Erhaltungssätze, daß bei einem Zeitschritt $t^n \rightarrow t^{n+1}$ die Totalvariation $\sum_i |u_{i+1} - u_i|$ nicht zunimmt.

Die Übertragung auf Systeme geschieht durch die Betrachtung der charakteristischen Amplituden der einzelnen Wellen. Umgeschrieben lautet der Fluß

$$\vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_{i+1/2}^{\text{Roe}} + \frac{1}{2} \cdot \sum_p \left[|I_p| \cdot [\Delta x - |I_p| \cdot \Delta t] \cdot \left(F_p \cdot \frac{a_p}{\Delta x} \right) \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2} \quad (7-40)$$

und mit der limitierten Steigung der charakteristischen Wellenamplitude $s_p = F_p \cdot a_p / \Delta x$

$$\vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_{i+1/2}^{\text{Roe}} + \frac{1}{2} \cdot \sum_p \left[|I_p| \cdot [\Delta x - |I_p| \cdot \Delta t] \cdot s_p \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2} \quad (7-41)$$

Die Limitierung läßt sich im Vergleich zum Roe-Fluß in einer Korrektur der Wellenamplitude $a_p - a_p'$ mit $a_p' = [\Delta x - |I_p| \cdot \Delta t] \cdot s_p$ schreiben

$$\vec{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} \cdot [\vec{F}_i + \vec{F}_{i+1}] - \frac{1}{2} \cdot \sum_p \left[|I_p| \cdot [a_p - a_p'] \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2} \quad (7-42)$$

Der Wert der limitierten Steigung s_p ist im Zellzentrum definiert und ihr Wert an der Zellgrenze hängt von der Ausbreitungsgeschwindigkeit der betrachteten Welle ab:

$$(s_p)_{i+1/2} = \begin{cases} (s_p)_i & \text{für } (I_p)_{i+1/2} > 0 \\ (s_p)_{i+1} & \text{für } (I_p)_{i+1/2} < 0 \end{cases} \quad (7-43)$$

Der Vektor der Steigungen im Zellzentrum ist eine Funktion ihrer benachbarten Steigungen an den Zellgrenzen. Die Limitierung kann in den einzelnen Charakteristikenfeldern individuell gestaltet werden.

Für weitere Einzelheiten kann die bereits zitierte einschlägige Literatur herangezogen werden.

7.4 Zwei neue Algorithmen zur Simulation der Ausbreitung von Vormischflammen

Den im folgenden beschriebenen numerischen Algorithmen wird eine Modellierung der Flammenausbreitung zugrundegelegt, die bewußt auf eine detaillierte Auflösung der Flammenzone verzichtet.

Eine nähere Betrachtung der reaktiven Eulergleichungen zeigt, daß Anfangs- und Randbedingungen zusammen mit den Rankine-Hugoniot Sprungbedingungen an der Flammendiskontinuität für die korrekte Berechnung der Flammenausbreitung nicht ausreichen /29/, da die Laxsche Entropiebedingung verletzt ist. Es fehlt die Festlegung der Brenngeschwindigkeit als Funktion des Gaszustandes im Verbrannten. In den nachfolgend beschriebenen numerischen Verfahren wird die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit deshalb als zusätzlicher Eingabeparameter vorgeschrieben. Die Festlegung der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom lokalen Strömungszustand und Reaktionsumsatz stellt eine wesentliche Aufgabe der Modellbildung dar und ist in Kapitel 3.3 bereits eingehend dargestellt worden.

Die größten numerischen Schwierigkeiten bei der Lösung der Eulergleichungen resultieren aus der Nichtlinearität der konvektiven Terme. Moderne numerische Algorithmen, wie das im vorigen Abschnitt beschriebene, bauen zur Lösung der Eulergleichungen auf sogenannten Capturing-Verfahren auf. Durch ihre Konstruktion, sie gehen stets von der konservativen Form der Eulergleichungen aus und garantieren dadurch die Erhaltungseigenschaften der Differentialgleichungen auch in der diskreten Formulierung, werden die Lage und die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Kontaktdiskontinuitäten und Stößen richtig wiedergegeben, ohne daß an den Fronten zusätzliche algorithmische Schritte notwendig werden. Die Diskontinuitäten werden lediglich über einige Gitterpunkte verschmiert wiedergegeben, wobei die Verschmierung vom speziellen numerischen Verfahren abhängt. Für die Berechnung von Flammendiskontinuitäten kann aber diese Verschmierung der Front nicht hingenommen werden, da eine korrekte Auswertung des Brenngesetzes, das die Kenntnis von unverbranntem oder verbranntem Gaszustand unmittelbar an der Flammenfront voraussetzt, nicht vorgenommen werden kann. Die naive Anwendung von Capturing-Verfahren würde die Flammenausbreitung an die spezifischen Eigenschaften des numerischen Verfahrens bei der Darstellung der Flammenfront unzulässig koppeln.

Prinzipiell besser geeignet zur Berechnung der Ausbreitung der Flammenfront sind demgegenüber sogenannte Tracking-Verfahren, die durch spezielle Rechenschritte eine scharfe Wiedergabe von Diskontinuitäten erlauben. Eine ganze Reihe von Verfahren sind gebräuchlich und in der wissenschaftlichen Literatur dargestellt. Wesentlicher Nachteil dieser Verfahren ist die programmtechnische Komplexität des

Frontverfolgungsalgorithmusses, insbesondere, wenn zwei- oder sogar dreidimensionale Problemstellungen gelöst werden sollen. So arbeiten Tracking-Verfahren meistens auf numerischen Gittern, die sich der verfolgenden Diskontinuität ganz oder zumindest teilweise anpassen. Dabei wird das angepaßte Gitter bei starker Verformung der Diskontinuität ebenfalls stark verformt. Das verwendete numerische Verfahren büßt dadurch an Genauigkeit ein. Um diesen Nachteil in Grenzen zu halten und Singularitäten im Gitter zu vermeiden, werden die Gitter häufig nach jedem Zeitschritt umverteilt, wodurch neben dem algorithmischen Aufwand auch Interpolationsfehler in Kauf genommen werden müssen.

Diese Schwierigkeiten und Nachteile von Tracking-Verfahren können vermieden werden, wenn nur die nichtverzichtbaren Elemente eines solchen Verfahrens in einen üblichen Algorithmus auf Basis eines Capturing-Verfahrens auf festen Gittern übernommen werden. Unter diese Methoden, die die Fronten innerhalb einer festen Gitterzelle approximieren, fallen die Volume-of-Fluid-Methode, die Benutzung von Marker-Partikeln entlang der Front und die Benutzung von Level-Sets zur Darstellung der Front. Eine Übersicht dazu findet sich bei Hyman /30/.

Im Rahmen des SFB 224 sind zwei Lösungsansätze erarbeitet worden, die die Berechnung der Flammenausbreitung in mehreren Dimensionen zum Ziel haben. Der erstere gehört zu der Klasse der Volume-of-Fluids-Methoden, der zweite zu den auf Level-Sets aufbauenden Verfahren.

In beiden Lösungsansätze müssen folgende grundlegende algorithmische Aufgaben bewältigt werden:

- Rekonstruktion der Front
- Konvektiver Transport der Front
- Berechnung der lokalen Frontkrümmung,

wobei sich die Lösungsansätze im Detail unterscheiden. Eine zusammenfassende Darstellung wird in den folgenden Abschnitten gegeben.

Als Voraussetzung zur Lösung der zuerst genannten Teilaufgabe werden in beiden Lösungsansätzen zur geeigneten Darstellung der Front eine Gewichtsfunktion eingeführt, indem für jede Zelle i,j des Rechengitters ein Volumenanteil f_{ij} definiert wird, der angibt, welcher Anteil des Zellvolumens hinter der Front liegt. Die Volumenverteilung ist die Gesamtheit der Volumenanteile in den einzelnen Zellen und liefert die Informationen für eine vollständige Beschreibung der Flammenkontur mit einer Genauigkeit, die größer als die Gitterauflösung ist. Die Verfahren unterscheiden sich in der Art wie diese Volumenverteilung zu jedem Zeitschritt des Rechenverfahrens erzeugt wird und wie diese Information zur Rekonstruktion der Front umgesetzt wird.

7.4.1 Numerisches Verfahren zur Berechnung der Flammenausbreitung mit der Volume-Of-Fluid-Methode

Zur Simulation des gesamten, mehrdimensionalen Verbrennungsvorgangs im Verbrennungsraum wird bei diesem Front Tracking Verfahren an Arbeiten angeknüpft, wie sie in /31/, /32/ dargestellt wurden. In diesen Arbeiten wird eine unendlich dünne laminare Flammenfläche verfolgt und ihre Faltung durch die Turbulenz mit dem Random-Vortex-Verfahren /33/, /34/, /35/ also einer Überlagerung der Grundströmung mit zufallsverteilten Wirbeln, realisiert. In der vorliegenden Arbeit wird dagegen das Fortschreiten der turbulenten Flamme als Zone mit gleichmäßig verteiltem Reaktionsumsatz betrachtet, ohne ihre Struktur im Detail aufzulösen. Bei diesem Vorgehen wird berücksichtigt, daß die turbulente Flammengeschwindigkeit eine Funktion der Turbulenzintensität und der Zeit ist. Für die zeitliche Entwicklung der turbulenten Flammengeschwindigkeit wurde die Abhängigkeit zugrundegelegt, wie sie in Gleichung 3.3-39 wiedergegeben ist. Von einer Beschreibung der Struktur der Reaktionszone wurde wegen des zu erwartenden hohen Rechenaufwandes zunächst abgesehen und das einfachere Entrainment-Modell benutzt /36/, /37/.

Rekonstruktion der Front durch Volume Of Fluid

Von Hirt und Nichols /38/ wurde ein Algorithmus zur Rekonstruktion einer Front unter dem Namen Volume Of Fluid (VOF) vorgestellt. Dieses Verfahren wurde für Problemstellungen aus der Fluidmechanik entwickelt und basiert auf der Annahme von zwei Fluiden, die durch eine Front voneinander getrennt sind. Die Anteile der beiden Fluide in einer Zelle werden, wie beschrieben, durch den Volumenanteil f_{ij} repräsentiert.

Durch jede Zelle mit einem Volumenanteil zwischen 0 und 1 wird eine Gerade konstruiert, die die Zelle im Verhältnis der Volumenanteile der Fluide b und u teilt. Die Steigung dieser Geraden ergibt sich aus einer Betrachtung der acht Nachbarzellen. Anhand dieser Nachbarzellen wird auch entschieden, auf welcher Seite der Geraden Fluid u bzw. Fluid b liegt.

Konvektion der Volumenverteilung

Der Algorithmus basiert auf dem von Poo und Ashgriz /39/ vorgeschlagenen Konvektionsalgorithmus und der von Hirt und Nichols /38/ vorgestellten Donor-Acceptor-Methode. Die Verfahren werden zur Verwendung mit einer VOF-Rekonstruktion modifiziert. Das Strömungsfeld wird als bekannt vorausgesetzt - repräsentiert durch die Geschwindigkeitskomponenten -, wie in Abbildung 7-4 links für eine Zelle dargestellt.

Bei dem Algorithmus werden jeweils zwei benachbarte Zellen betrachtet und der Fluß über die gemeinsame Grenze bestimmt. Die stromauf gelegene Zelle ist die Donor-Zelle und die stromab gelegene Zelle ist die Acceptor-Zelle. Im Gegensatz zu der

Flußberechnung in /40/ wird der Fluß hier nur durch die Donor-Zelle bestimmt. Für die Berechnung des Flusses aus der Donor-Zelle wurde die beschriebene VOF-Rekonstruktion zugrunde gelegt. Über eine rein geometrische Betrachtung der Fläche des Verbrannten in der Donor-Zelle und der relevanten Strömungskomponente läßt sich ermitteln, welcher Flächenanteil des Verbrannten aus dieser Zelle pro Zeitschritt herausgetragen wird. Abbildung 7-4 rechts soll das Vorgehen verdeutlichen. Darin beschreibt die geschwärtzte Fläche den Fluß des Volumenanteils, der während des Zeitschritts Δt zwischen beiden Zellen ausgetauscht wird.

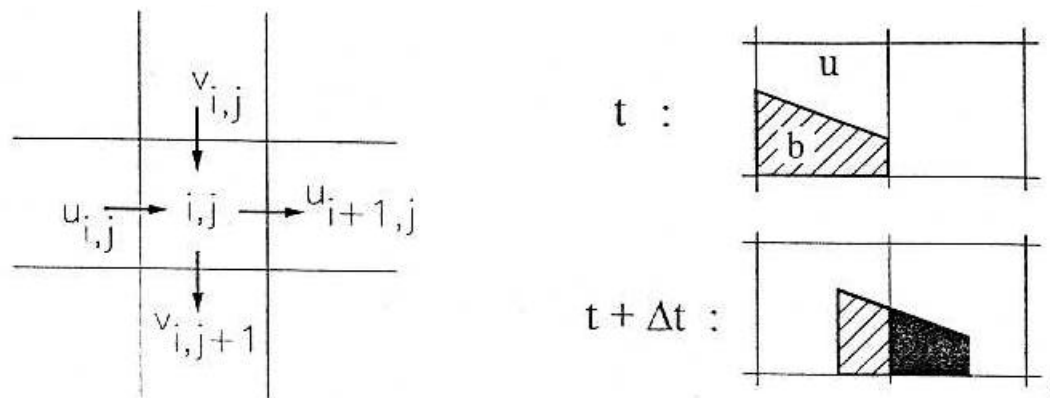


Abbildung 7-4 Positionen der Geschwindigkeitsvektoren (links), Prinzip des Konvektionsalgorithmus (rechts)

Für die Konvektionsberechnung der gesamten Volumenverteilung wird eine Aufspaltung in die beiden Achsenrichtungen vorgenommen und die Konvektion in diese beiden Richtungen nacheinander durchgeführt. Für eine Richtung werden dann nacheinander alle möglichen Paare v von benachbarten Zellen betrachtet und die jeweiligen Flüsse ausgewertet. Die berechneten Flüsse werden jeweils vom Volumenanteil der Donor-Zelle subtrahiert und zum Volumenanteil der Acceptor-Zelle hinzuaddiert. Nachdem diese Prozedur für eine Richtung komplett durchgeführt worden ist, wird die Front neu rekonstruiert und der Vorgang für die andere Richtung wiederholt.

Der Algorithmus weist erhebliche Verbesserungen gegenüber herkömmlichen Algorithmen auf, wie Abbildung 7-5 zeigt. Als Testfall wurde eine kreisrunde Front einer Strömung unterworfen, die eine Festkörperrotation beschreibt. Während die Konvektion mit Hilfe des beschriebenen Algorithmus kaum zu Deformationen führt (rechts), wird der Kreis bei Verwendung einer Vergleichsmethode, basierend auf einer SLIC-Rekonstruktion /40/, erheblich entstellt (links).

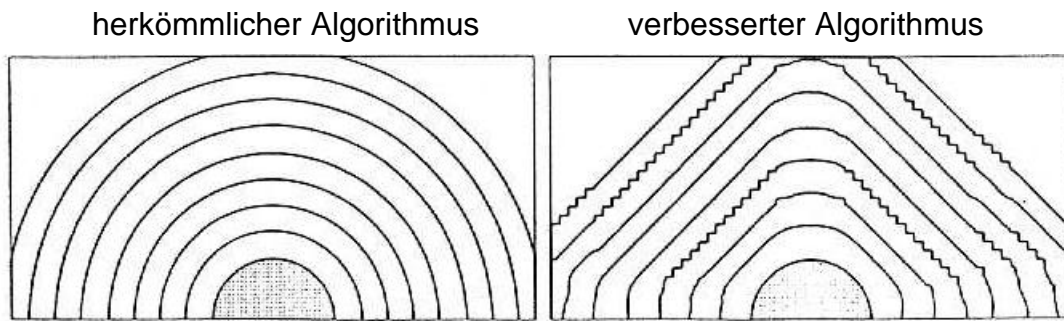


Abbildung 7-5 Testrechnungen für Konvektionsalgorithmen

Zusätzlich zu dem soeben diskutierten rein passiven Transport durch das Strömungsfeld, breitet sich eine Verbrennungsfront aktiv relativ zum Hintergrundgas aus. Dabei verschiebt sich die Front im Zeitintervall dt mit einer vorgegebenen aktuellen Flammengeschwindigkeit s_b um den Betrag $s_b dt$ normal zu sich selbst.

Die Normalenrichtung wird durch die VOF-Rekonstruktion für jede Frontzelle direkt geliefert. Die durch die Frontverschiebung aufgespannte Fläche - in Abbildung 7-6 schraffiert dargestellt - wird auf die überstrichenen Zellen entsprechend des darin befindlichen Anteils aufgeteilt und führt auf eine neue Volumenverteilung. Gleichzeitig kommt dieser Fläche bei der Bestimmung der Quellenverteilung in der Strömungsrechnung Bedeutung zu.

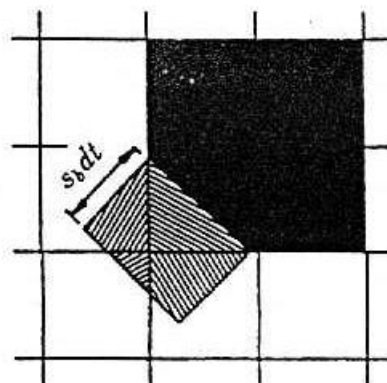


Abbildung 7-6 Prinzip des Ausbreitungsalgorithmus

Auch für die Ausbreitungsalgorithmen wurden Testrechnungen durchgeführt. In Abbildung 7-7 wird eine kreisrunde Flamme betrachtet, die sich nach außen ausbreitet und dabei keiner zusätzlichen Konvektion unterworfen ist. Die rechte Seite zeigt Ergebnisse nach dem neuen Algorithmus, die Resultate auf der linken Seite basieren auf dem SLIC-Algorithmus nach [33], [41].

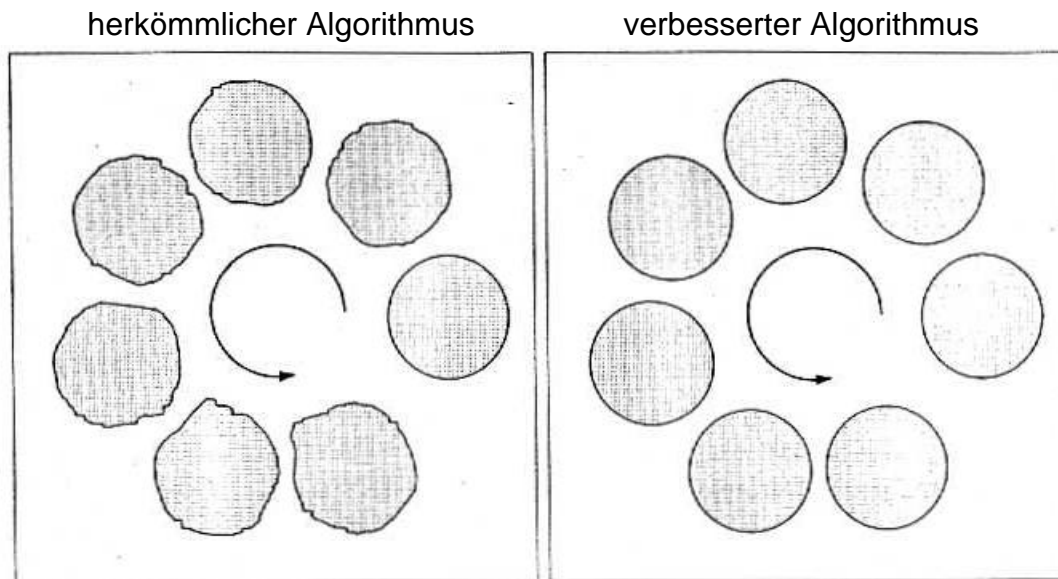


Abbildung 7-7 Testrechnung für Ausbreitungsalgorithmen

Die Testrechnungen zeigen, daß der herkömmliche Algorithmus die senkrechten bzw. waagerechten Richtungen bevorzugt, während die oben beschriebene Methode keine solche Tendenz aufweist. Darüberhinaus sind die Ergebnisse des herkömmlichen Algorithmus von der Zeitschrittweite abhängig.

Entrainment-Modell

Da nicht mehr eine unendlich dünne laminare Flammenfläche, sondern eine Verbrennungszone mit endlicher Dicke betrachtet wird, muß jetzt auch die Zeit berücksichtigt werden, die für die Umsetzung des eintretenden Gases benötigt wird. Dazu wird ein Entrainment-Modell herangezogen /36/, /37/, /42/. Bei diesem Modell tritt das Frischgas in die Flammenzone in Form von Volumenelementen einer charakteristischen Größe l ein. Diese Volumenelemente verbrennen an ihrer Oberfläche, wobei eine laminare Flamme mit der laminaren Flammengeschwindigkeit s_1 nach innen fortschreitet. Während dieses Verbrennungsvorganges wird das Volumenelement mit der Strömung in der Brennkammer mitgeschleppt. Zum Zeitpunkt seines vollständigen Ausbrands markiert jedes Element durch seine momentane Position einen Punkt der Flammenzonen-Rückfront.

Für die numerische Simulation ist es notwendig, das in einem bestimmten Zeitschritt verbrennende Volumen zu kennen. Wie aus Abbildung 7-8 ersichtlich ist, nimmt der Radius des unverbrannten Kerns eines Volumenelementes mit der Zeit ab:

$$r(\hat{t}) = l - s_1 \cdot \hat{t} \quad (7-44)$$

Hier bezeichnet \hat{t} die seit dem Eintritt in die Flammenzone verstrichene Zeit. Um das aktuelle Volumen $V_e(\hat{t})$ des Elementes zu bestimmen, muß eine Annahme über seine geometrische Form getroffen werden.

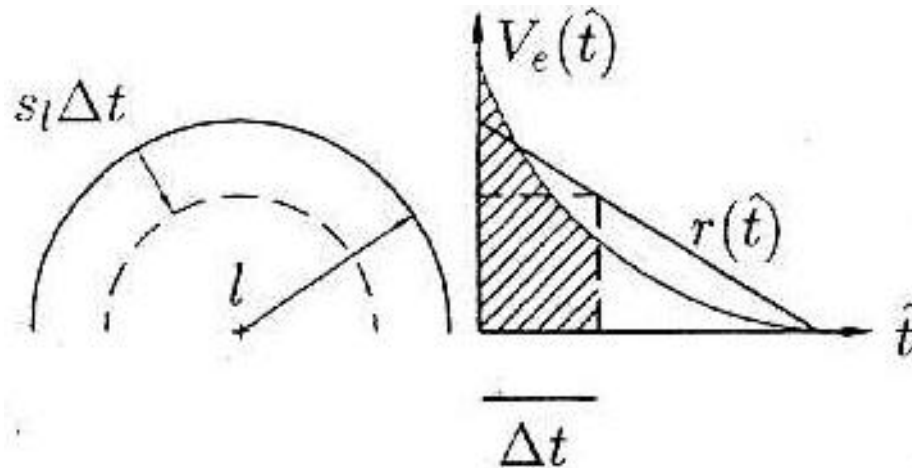


Abbildung 7-8 Schematische Darstellung eines Volumenelementes aus dem Entrainment-Modell

Ashurst /43/ zeigt, daß unter gewissen Voraussetzungen zylindrische Strukturen in isotroper, homogener Turbulenz besonders stabil sind, weshalb für die Simulationen von einer Volumenabnahme des Unverbrannten entsprechend einer Zylindergeometrie ausgegangen wird. Damit kann für jedes Volumenelement das aktuell verbrennende Volumen bestimmt werden. Das insgesamt in einem Zeitschritt verbrennende Volumen ergibt sich dann als Summe über alle aktiven Volumenelemente. Die Änderung des unverbrannten Volumens eines Volumenelementes i in einem Zeitschritt ist ein direktes Maß für den lokalen Reaktionsumsatz an der Position des Volumenelementes. Die Gesamtheit der Volumenelemente legt damit die räumliche Verteilung des Umsatzes fest.

Modellierung des Strömungsfeldes

Für die Anwendung der Konvektionsalgorithmen ist die Kenntnis des Strömungsfeldes erforderlich. Bei seiner Bestimmung wird vorausgesetzt, daß die thermodynamischen Größen bereits bekannt sind. Das Strömungsfeld wird wesentlich bestimmt durch die Expansion des Abgases.

Einem allgemein üblichen Ansatz bei Front-Tracking-Anwendungen folgend /32/, /44/, /45/, /46/, /47/, /48/ wird die Strömung hier durch eine Potentialgleichung beschrieben. Das bedeutet, daß Reibungs- und Wärmeleitungseffekte vernachlässigt werden und die Strömung als drehungsfrei angesehen wird. Insbesondere die zuletzt genannte Einschränkung kann bei Verwendung der Eulergleichungen aufgehoben werden - an

ihrer Implementierung in das Front-Tracking-Verfahren wird zur Zeit gearbeitet, um Wirbelströmungen in der Brennkammer zu simulieren. Die hier vorgestellten Rechnungen sollen jedoch auf Potentialströmungen beschränkt bleiben. Das folgende Verfahren lehnt sich eng an das von Barr /31/, /32/, /41/ vorgeschlagene an. Die Strömung wird durch die Poissongleichung in der Form

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} = -\frac{1}{r} \cdot \frac{dr}{dt} = s_{ij} \quad \text{mit:} \quad \frac{\partial F}{\partial x} = u \quad \text{und} \quad \frac{\partial F}{\partial y} = v \quad (7-45)$$

beschrieben. In dieser Gleichung bezeichnen F das Geschwindigkeitspotential und s_{ij} einen örtlich veränderlichen Quellterm, dessen Bestimmung im folgenden erläutert wird. Durch geeignete Wahl dieses Quellterms läßt sich die zunächst für inkompressible Strömungen formulierte Gleichung auch auf kompressible anwenden. Ist das Potential als Lösung der Poissongleichung bekannt, so läßt sich das Geschwindigkeitsfeld durch Differenzieren gewinnen. Die Quellstärke in einer Zelle setzt sich aus drei Anteilen zusammen:

- das Material, das im aktuellen Zeitschritt verbrennt, expandiert und wirkt als Quelle
- das Material, das im aktuellen Zeitschritt unverbrannt bleibt, wird komprimiert und muß als Senke modelliert werden
- das Material, das vor dem aktuellen Zeitschritt schon verbrannt war, wird komprimiert und liefert ebenfalls einen Anteil als Senke.

Diese drei Punkte finden sich als Terme der folgenden Formulierung für die Quellstärke unter Verwendung der Volumenanteile wieder:

$$s_{ij} = \frac{f_{ij}^n - f_{ij}^{n-1}}{\Delta t} \cdot \frac{r_u^{n-1} - r_b^n}{r_n^n} - \frac{f_{ij}^{n-1}}{\Delta t} \cdot \frac{r_b^n - r_b^{n-1}}{r_b^n} - \left(\frac{1 - f_{ij}^n}{\Delta t} \cdot \frac{r_u^n - r_u^{n-1}}{r_u^n} \right) \quad (7-46)$$

Hier bezeichnet n den Zeitschritt. Äußerst wichtig ist die Plazierung der Quellen, die aktuell in der Front neu entstanden sind. Um physikalisch sinnvolle Ergebnisse zu bekommen, wurden diese Quellen eine Zelldiagonale hinter die Front verschoben, um dann auf die vier nächsten Zellenmitten aufgeteilt zu werden. Die Aufteilung erfolgt über eine Flächengewichtung, wie sie in Abbildung 7-9 verdeutlicht wird. Aus der jeweiligen Teilfläche ergibt sich die Quellstärke, welche in der Zelle gleichen Indexes positioniert wird. Diese Maßnahme sorgt dafür, daß die Expansion immer im Verbrannten unmittelbar hinter der Front stattfindet, und diese dann in die physikalisch einzig sinnvolle Richtung befördert wird. Darüber hinaus ergibt sich noch ein gewisser Glättungseinfluß auf die sonst recht instabile Front.

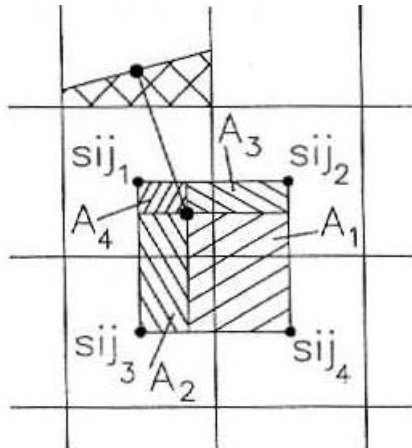


Abbildung 7-9 Schematische Darstellung der Positionierung und der Verteilung der Quellterme

7.4.2 Erweitertes Godunov-Typ-Verfahren zur Berechnung schneller Vormischflammen und des Deflagrations-Detonations-Übergangs

Das hier vorzustellende Verfahren gehört zu den Level-Set-Verfahren zur Verfolgung von Diskontinuitäten in Strömungen. Die Verwendung des Level-Set-Ansatzes wird durch das Flamelet-Modell für Vormischflammen nahegelegt. Die in diesem Modell definierte Transportgleichung für den Skalar G ist der Gleichung für einen geeigneten Level-Set äquivalent, da definitionsgemäß eine Isolinie $G = G_0$ der Hyperfläche $G(\vec{x}, t)$ die momentane Lage der Flammenfront repräsentiert.

Zahlreiche Verfahren zum Verfolgen von Verdichtungsstößen (siehe z.B. Chern und Colella /49/) und die Anwendung auf Stoßverfolgung bei der Simulation von Detonationen von Bourlioux /50/, /51/) und Kontaktunstetigkeiten (siehe z.B. den SLIC-Algorithmus /40/) wurden bereits entwickelt. Flammen sind oft als „kalte“, nicht-reaktive Fronten im Rahmen von Level-Set-Ansätzen behandelt worden /52/, /53/. Mangelhaft ist daran die fehlende Interaktion zwischen Wärmefreisetzung und dem Strömungsfeld, der bei der physikalischen Beschreibung eine zentrale Bedeutung zukommt.

Arbeiten, bei denen die Expansion des Gases aufgrund der Flamme berücksichtigt wird, sind in /54/, /55/ (level sets) und in /8/ (volume of fluid) veröffentlicht. In beiden Arbeiten wird ein Zwei-Zonen-Modell verwendet, bei dem die Flamme verbranntes von unverbranntem Gas trennt. In den zwei Zonen sind Druck, Dichte und Temperatur jeweils örtlich konstant und das Geschwindigkeitsfeld wird durch eine quelltermbehaftete Potentialgleichung beschrieben. Der Quellterm berücksichtigt die Expansion des Gases und die Druckerhöhung in geschlossenen Behältern aufgrund der Wärmefreisetzung.

Der Nachteil dieser Formulierungen liegt in der Annahme der örtlich konstanten Zustandsgrößen, die, besonders bei schnellen Flammen, nicht mehr gewährleistet ist.

Wenn die reaktiven Eulergleichungen zur Berechnung der Ausbreitung der diskontinuierlichen Flammenfront herangezogen werden, fehlt, wie im einleitenden Abschnitt bereits dargelegt, zur Berechnung der Ausbreitung von Deflagrationen im Strömungsfeld eine Information, um das Gleichungssystem an der Flammenfront zu schließen.

Für die auf Diffusion basierende Flamme muß die fehlende Information durch die Vorgabe der Brenngeschwindigkeit s_u , die eine charakteristische Größe der Flammenstruktur ist, eingeführt werden.

Als eine Konsequenz für die numerische Behandlung ergibt sich die Notwendigkeit, einen unverbrannten Zustand \vec{U}_u für die Auswertung der Brenngeschwindigkeit $s_u = s_u(\vec{U}_u)$ zu definieren. Ein typisches Flammenprofil besitzt große Sprünge der Zustandsgrößen. Typische Verhältnisse liegen bei

$$V = r_u / r_b = s_b / s_u \approx T_b / T_u \approx 7, \quad (7-47)$$

wodurch wegen der unvermeidbaren numerischen Diffusion unphysikalische Zwischenzustände produziert werden, die sich als Basis für die Auswertung des Brenngesetzes verbieten. Eine scharfe Trennung zwischen verbranntem und unverbranntem Zustand muß also gefordert werden. Die gasdynamische Wechselwirkung zwischen Flamme und Strömungsfeld wird ohne über die Annahme einer unendlich dünnen Flamme hinausgehende zusätzliche Vereinfachungen erfaßt. Daher ist diese Formulierung insbesondere auch für schnelle Flammen geeignet und erlaubt, den Übergang von Deflagration zu Detonation - ein wesentlicher Mechanismus bei der klopfenden Verbrennung - numerisch zu simulieren. Der Zugang zur Lösung dieser Aufgabenstellung basiert auf einem Flammen-Tracking, das in Anlehnung an das Stoß-Tracking /56/, /57/, basierend auf der Ausbreitung von Wellen nach LeVeque /58/, /59/, /60/, entwickelt wurde, und ein Flammen-Rekonstruktionsverfahren, welches auf der Repräsentation der Deflagration durch die G-Gleichung beruht. Beiden Verfahren ist gemeinsam, daß sie als Wellenverteilungsalgorithmen geschrieben werden können.

Tracking durch Wellenverteilung

Ausgehend von der Wellendarstellung formulierte LeVeque ein Tracking-Verfahren für die Behandlung von Stoßwellen. Die grundsätzliche Idee ist es, eine starke Diskontinuität zu verfolgen und Anteile anderer schwacher Wellen linear zu überlagern.

Dort, wo die Flamme eine Zelle (i) im Punkt x_f^n schneidet (die Zelle, die die Flamme enthält, wird im folgenden die Mischzelle genannt), wird diese in zwei Teilzellen (i)_b im Intervall $x_{i-1/2}, x_f^n$ und (i)_u in $x_f^n, x_{i+1/2}$ mit den Zustandsvektoren $\vec{U}_{i,u}$ und $\vec{U}_{i,b}$ unterteilt. Durch Verfolgung der einzelnen Wellen über Zellgrenzen hinweg, gelingt es, die aus der CFL-Bedingung resultierenden sehr kleinen Zeitschrittweiten $\Delta t = c\Delta_{\min}/|I|_{\max}$ zu vermeiden.

Die Wellen ergeben sich aus den gespeicherten verbrannten und unverbrannten Zuständen der Teilzellen, mit denen das Flammen-Riemann-Problem gelöst wird (Abbildung 7-10). Eine Beschreibung des hierzu notwendigen iterativen Verfahrens wird z.B. in /61/ gegeben. Die gegebenen Zustände $\vec{U}_{L,R}$ stellen die Anfangsdaten dar. Gesucht wird der Druck p_u vor der Flamme, nachdem eine Stoßwelle oder ein Expansionsfächer über den Zustand \vec{U}_R gelaufen ist. Mit dem Druck p_u ist über die Stoßbedingung oder die isentropen Gleichungen für den Expansionsfächer der unverbrannte Zustand \vec{U}_u vor der Flamme gegeben. Mit dem Zustand \vec{U}_u , dem Brenngesetz $s_u = s_u(\vec{U}_u)$ und den Rankine-Hugoniot-Bedingungen für die Flamme folgt der verbrannte Zustand \vec{U}_b hinter der Flamme. Da der Druck im verbrannten Zustand p_b über der Kontaktunstetigkeit konstant bleibt ($p_b = p_S$) folgt mit p_S über die Stoßbedingungen oder die isentropen Gleichungen für den linkslaufenden Expansionsfächer der Zustand \vec{U}_S . Die Bedingung für die Konvergenz lautet dann, daß die Geschwindigkeiten über der Kontaktunstetigkeit gleich bleiben ($u_b = u_S$), womit das System iterativ gelöst werden kann.

Aus der Lösung des Flammen-Riemann-Problems folgt mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme D_f die neue Flammenposition zu $x_f^{n+1} = x_f^n + D_f \cdot \Delta t$. Es sei angenommen, daß die Flamme in die Nachbarzelle ($i+1$) wandert. Die neue Mischzelle zum Zeitpunkt t^n wird ebenfalls in zwei Teilzellen ($i+1$)_b im Intervall $x_{i+1/2}, x_f^{n+1}$ und ($i+1$)_u in $x_f^{n+1}, x_{i+3/2}$ mit den Zustandsvektoren $\vec{U}_{i+1,u} = \vec{U}_{i+1,b} = \vec{U}_{i+1}$ unterteilt. Die geometrischen Verhältnisse sind in Abbildung 7-10 dargestellt. Zusätzlich zum Flammen-Riemann-Problem an der Flammenposition x_f^n werden an den Zellgrenzen $x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}$ Roe-Riemann-Probleme gelöst. Die einzelnen Wellen überstreichen während des Zeitschritts ein Volumen $I_p \Delta t$. Der Wellensprung $a_p \cdot \vec{R}_p$ wird auf alle teilweise oder ganz überstrichenen Zellen verteilt. Der Sprung der Flamme, wie sie in Abbildung 7-11 dargestellt ist, wird jeweils auf die Zelle (i)_u und ($i+1$)_b aufgeschlagen. Nach der Aufsummierung der Wellensprünge wird der geteilten Zelle (i) durch konservative Mittelung ein neuer Mittelwert

$$\Delta x \cdot \vec{U}_i^{n+1} = \left[x_f^n - x_{i-1/2} \right] \cdot \vec{U}_{i,b}^{n+1} + \left[x_{i+1/2} - x_f^n \right] \cdot \vec{U}_{i,u}^{n+1} \quad (7-48)$$

zugeordnet und die Teilzellen $(i)_{u,b}$ eliminiert, während die Teilzellen $(i+1)_{u,b}$ gespeichert werden. Durch diese Vorgehensweise wird das Problem der CFL-Bedingung für kleine Zellen umgangen.

Dieses Verfahren ist sehr robust und wird im folgenden als Referenzverfahren für die Simulation von Flammen und DDT in einer Dimension benutzt. Die Nachteile dieses Verfahrens sind, daß es beim Übergang auf zwei Dimensionen sehr aufwendig wird und die propagierten Teilstücke der alten Front keine geschlossene neue Front ergeben. Diese muß durch Interpolation erzeugt werden. Hier wird ein neues Verfahren vorgestellt, daß dieses Problem umgeht und wesentlich einfacher zu realisieren ist.

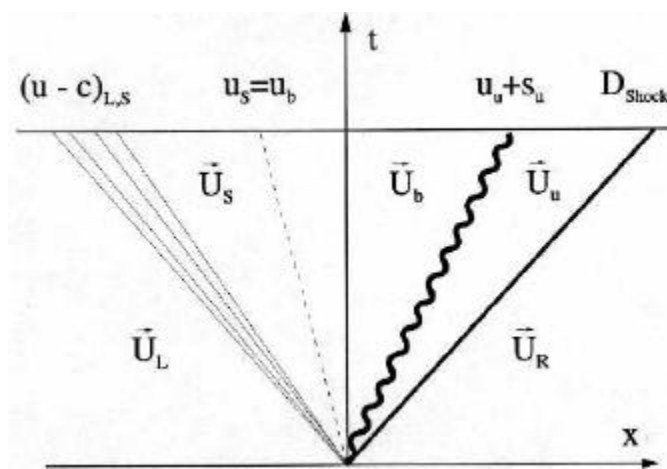


Abbildung 7-10 Flammen-Riemann-Problem

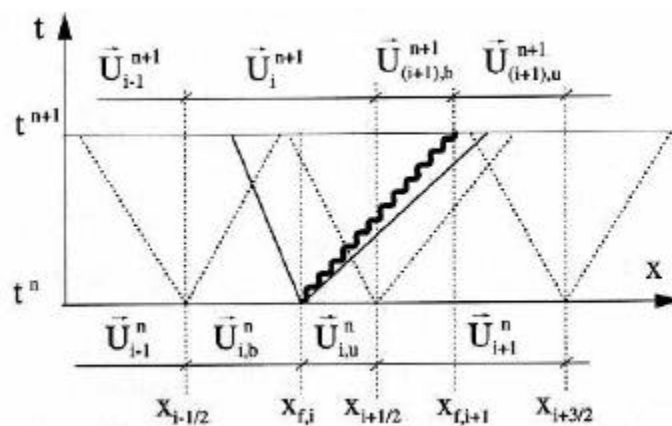


Abbildung 7-11 Flammen-Tracking in 1-D

Flammen-Rekonstruktionsverfahren

Wellen- und Flußformulierung

Das Flammen-Rekonstruktionsverfahren versucht, das im vorigen Abschnitt beschriebene numerische Verfahren soweit wie möglich zu vereinfachen und dabei die Vorteile des Tracking beizubehalten. Die Grundidee ist es, nur noch die Flamme als Diskontinuität zu betrachten und die Speicherung der Zustände in den verbrannten und unverbrannten Teilzellen zu umgehen.

Das Verfahren soll folgende Eigenschaften besitzen:

- Das Verfahren soll konservativ und zu allen Standard-Capturing-Verfahren kompatibel sein, die in der konservativen Flußformulierung mit einem zusätzlichen Quellterm geschrieben sind. Die Formulierung soll vereinbar sein mit dem Richtungs-Operator-Splitting. Das Verfahren soll dadurch über einfache Schnittstellen in andere Codes implementiert werden können.
- Die aufwendige Speicherung der komplizierten Teilgeometrien der Mischzellen und die komplizierte Bilanzierung für diese Geometrien, die bei reinen Tracking-Verfahren auftreten, sollen dadurch vermieden werden, daß die Bilanzgleichungen nur für Zellmittelwerte auf einem kartesischen Gitter konstanter Schrittweite gelöst werden. Dies wird möglich durch die korrekte Auswertung der Zustandsgrößen an den Zellflächen aufgrund einer Rekonstruktion von unverbrannten und verbrannten Zuständen über der Flamme.
- Die Rekonstruktion basiert auf der Erhaltung der konservativen Größen und den Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen über der Flamme, wodurch die Kopplung zwischen der wärmefreisetzenden Flamme und der Strömung in korrekter, nichttrivialer Weise gewährleistet werden soll.

Aufbauend auf den numerischen Fluß des Roe-Verfahrens (Gleichung (7-35), Gleichung (7-42)) wird die einfache Wellenform (Gleichung (7-42)) um den Flammenanteil $v_f \cdot \Delta \vec{U}_f = D_f \cdot \Delta t / \Delta x \cdot \Delta \vec{U}_f$ zu

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - \sum_p \left[\left[\vec{v}_p \cdot \mathbf{a}_p + \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2} - \sum_p \left[\left[\vec{v}_p^+ \cdot \mathbf{a}_p - \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{i-1/2} \quad (7-49)$$

erweitert. Hierbei muß der Flammensprung $\Delta \vec{U}_f = \vec{U}_u - \vec{U}_b$ derart beschaffen sein, daß die gasdynamischen Effekte der Flamme berücksichtigt werden. Das Verfahren sei zunächst in einer Dimension anhand der Abbildung 7-12 erklärt. Die Zelle (*i*) sei die Mischzelle zum Zeitpunkt t^n . Aus der Flammenposition x_f^n läßt sich der Anteil von

verbranntem und unverbranntem Volumen V_b und V_u ermitteln und der Volumenanteil f_i^n des verbrannten Gases der Mischzelle

$$f_i^n = \frac{V_b}{V_u + V_b} = \frac{x_f^n - x_{i-1/2}}{\Delta x} \tag{7-50}$$

angeben. Ausgangspunkt der Rekonstruktion ist der Mittelwert der Zustandsgrößen in der Mischzelle \vec{U}_i^n . Mit den verbrannten $\vec{U}_{i,b}$ und unverbrannten Zuständen $\vec{U}_{i,u}$, die als Funktion des verbrannten Volumenanteils spezifiziert werden müssen, werden nun die Roe-Riemann-Probleme an der Zellfläche $x_{i-1/2}$ mit $\vec{U}_{i-1}^n, \vec{U}_{i,b}^n$ und an der Zellfläche $x_{i+1/2}$ mit $\vec{U}_{i,u}^n, \vec{U}_{i+1}^n$ gelöst. Dies würde einer numerischen Flußauswertung in erster Ordnung

$$\vec{F}_{i-1/2} = \vec{F}_{i-1/2} \left[\vec{U}_{i-1}^n, \vec{U}_{i,b}^n \right] \quad \vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_{i+1/2} \left[\vec{U}_{i,u}^n, \vec{U}_{i+1}^n \right] \tag{7-51}$$

entsprechen. Aus der Lösung der Roe-Riemann-Probleme folgen nun die einzelnen Wellensprünge an den Zellflächen

$$\left[v^\mp \cdot \vec{a} \cdot \vec{R} \right]_{i \pm 1/2}, \tag{7-52}$$

wobei die rechtslaufende bzw. linkslaufende Welle aus der Zellfläche $x_{i-1/2}$ bzw. $x_{i+1/2}$ ein Teilvolumen $v_{i-1/2}^+ \cdot \Delta x$ bzw. $v_{i+1/2}^- \cdot \Delta x$ der Zelle (i) überstreicht (der Index p der p -ten Welle wurde zunächst weggelassen).

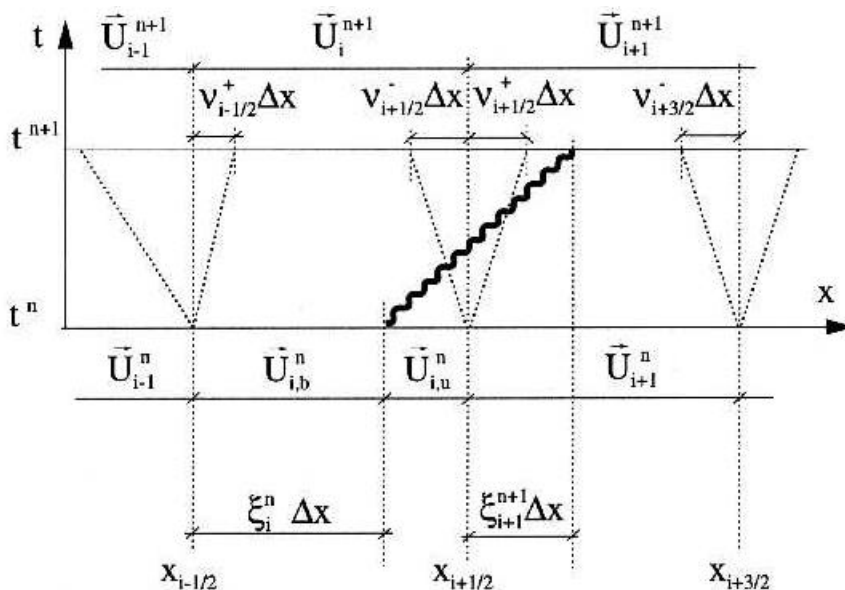


Abbildung 7-12 Wellenverteilung beim Flammen-Rekonstruktionsverfahren

Bezüglich der Terme höherer Ordnung \mathbf{a}' muß beachtet werden, daß keine Informationen von der anderen Flammenseite benutzt werden, damit nicht über die Flammendiskontinuität hinweg diskretisiert wird. Steigungen in der Mischzelle s_i werden entweder zu Null gesetzt oder aus der jeweiligen Richtung extrapoliert

$$\sigma_{i,b} = \begin{cases} 0 \\ s_{i-1} \end{cases}, \quad \sigma_{i,u} = \begin{cases} 0 \\ s_{i+1} \end{cases}. \quad (7-53)$$

Das Verfahren ist daher an der Diskontinuität erster Ordnung genau.

Zusätzlich zu den gasdynamischen Wellensprüngen $\mathbf{a} \cdot \vec{R}$ muß der Sprung der Flamme $\vec{U}_{i,b}^n - \vec{U}_{i,u}^n$ auf das Volumen $D_f \Delta t$ verteilt werden. Hier wird D_f aus dem unverbrannten Zustand $\vec{U}_{i,u}^n$ berechnet zu

$$D_f = u_{i,u} + s_u \left[U_{i,u}^n \right]. \quad (7-54)$$

Für $D_f > 0$ bleibt die Flamme während des Zeitschritts Δt entweder in der Zelle (i) oder wandert in die Zelle ($i+1$) und die neuen verbrannten Volumenanteile berechnen sich zu

$$f_i^{n+1} = \min \left[1, f_i^n + v_f \right], \quad f_{i+1}^{n+1} = \max \left[0, v_f - (1 - f_i^n) \right]. \quad (7-55)$$

Die Bilanz für die Zellen $j=i$ und $j=i+1$ schreibt sich in Anlehnung an Abbildung 7-12 mit $\Delta f_j = f_j^{n+1} - f_j^n$

$$\begin{aligned} \vec{U}_j^{n+1} &= \vec{U}_j^n - \sum_p \left[\left[v_p^- \cdot \mathbf{a}_p + \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{j+1/2} \\ &- \sum_p \left[\left[v_p^+ \cdot \mathbf{a}_p - \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{j-1/2} - \Delta f_j (\vec{U}_f)_i \end{aligned} \quad (7-56)$$

Hier wird der Flammensprung $v_f (\Delta \vec{U}_f)_i$ aus Zelle (i) also auf zwei Nachbarzellen verteilt und so wie beim Flammen-Tracking die Problematik der CFL-Bedingung für kleine Teilzellen $f \Delta x$ bzw. $(1-f) \Delta x$ umgangen. Der große Vorteil dieser Darstellung ist, daß die Bilanzgleichungen nur für Zellmittelwerte \vec{U}_i berechnet werden. Somit werden die aufwendige Speicherung und die Bilanzierung der Teilzellen, wie sie beim Flammen-Tracking auftreten, überflüssig.

Eine andere Darstellungsweise geht von der Flußformulierung aus und beachtet, daß die Flamme durch ihre Relativbewegung zur Strömung eine chemische Wärmefreisetzung verursacht, die als Quellterm in der Speziesgleichung wiederzufinden ist. Dabei sei die Wellenformulierung für eine einzelne stationäre Flamme, die den unverbrannten Zustand \vec{U}_u vom verbrannten Zustand \vec{U}_b trennt und sich mit konstanter Geschwindigkeit D_f innerhalb einer Zelle (i) fortbewegt, ausgedrückt. Demnach verschwinden sämtliche gasdynamischen Wellen aus der Bilanz und nur noch der Flammensprung trägt zur Änderung des Zustandsvektors bei

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - \frac{D_f \cdot \Delta t}{\Delta x} \cdot [\vec{U}_u - \vec{U}_b]. \quad (7-57)$$

Über die Sprungbedingungen für Masse, Impuls und Energie

$$\vec{E}_b - \vec{E}_u = D_f \cdot [\vec{U}_b - \vec{U}_u] \quad (7-58)$$

kann der Wellensprung in eine Flußdifferenz umgeformt werden. Die numerischen Flüsse an den Zellgrenzen entsprechen dann jeweils den Flüssen im Verbrannten bzw. Unverbrannten. Für die Speziesgleichung muß die Relativbewegung berücksichtigt werden. Der Speziesprung schreibt sich dann mit $D_f = u_u + s_u = u_b + s_b$ zu

$$D_f \cdot \Delta(\mathbf{r} \cdot Y) = \Delta(\mathbf{r} \cdot u \cdot Y) + \Delta(\mathbf{r} \cdot s \cdot Y) = \Delta f(\mathbf{r} \cdot Y) + \mathbf{r}_u \cdot s_u \cdot \Delta Y. \quad (7-59)$$

Die Bilanz nimmt dann die Erhaltungsform mit zusätzlichem Quellterm \vec{q} in der Speziesgleichung

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot [\vec{F}_{i+1/2} - \vec{F}_{i-1/2}] - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \vec{q} \quad (7-60)$$

mit

$$\vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_u \quad \vec{F}_{i-1/2} = \vec{F}_b \quad \vec{Q} = (\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})_u \cdot (0, 0, 0, Y_u - Y_b)^T \quad (7-61)$$

an.

Diese Formulierung in Erhaltungsform mit zusätzlichem Quellterm ist in vielen Anwendungen wiederzufinden und zeigt, daß das Verfahren kompatibel ist mit sämtlichen Strömungslösern, die auf Flußbilanzen und zusätzlichen Quelltermen beruhen.

Für den Fall, daß die Flamme über die Zellgrenze $x_{i+1/2}$ läuft, muß der numerische Fluß aufgrund des erfahrenen Wellensprungs in einer korrekten, zeitlich gemittelten Form modifiziert werden

$$\vec{F}_{i+1/2} = \vec{F}_{i+1/2}^n - \max \left[0, \frac{D_f \cdot \Delta t - ((1 - f_i^n) \cdot \Delta x)}{D_f \cdot \Delta t} \right] \cdot (\vec{E}_u - \vec{E}_b). \quad (7-62)$$

Analog zu dieser zeitlichen Mittelung muß der Quellterm auf die Zellen (i) und ($i+1$) verteilt werden. Die verbrannten Volumenanteile ändern sich in beiden Zellen durch die Flamme um jeweils $\Delta f_{i+1,i} = f_{i+1,i}^{n+1} - f_{i+1,i}^n$. Anteilmäßig wird der Quellterm $\vec{Q} = (\mathbf{r}_u \cdot \mathbf{s}_u)_i \cdot (Y_u - Y_b) \cdot (0, 0, 0, 1)^T \cdot \Delta t / \Delta x$ auf die Zellen (i) und ($i+1$) verteilt. Die Quellterme in den Speziesgleichungen lauten dann

$$\vec{Q}_i = \frac{\Delta f_i}{\Delta f_i + \Delta f_{i+1}} \cdot \vec{Q} \quad \vec{Q}_{i+1} = \frac{\Delta f_{i+1}}{\Delta f_i + \Delta f_{i+1}} \cdot \vec{Q}. \quad (7-63)$$

Beim Übergang auf zwei Dimensionen muß noch die räumliche Mittelung über einer Zellfläche beachtet werden. Dies wird allerdings nicht mehr erläutert, da hier durchweg die Wellendarstellung benutzt wurde.

Rekonstruktion der verbrannten und unverbrannten Zustände

Zur Vervollständigung der Lösung müssen noch die Zustände \vec{U}_u und \vec{U}_b aus dem bekannten Zellmittelwert der Mischzelle \vec{U} bestimmt werden. Aufgrund der Erhaltung der konservativen Größen muß sich der Mittelwert aus einer Volumengewichtung des verbrannten und unverbrannten Zustandes ergeben

$$\vec{U} = f \cdot \vec{U}_b + (1 - f) \cdot \vec{U}_u, \quad (7-64)$$

wobei f der bekannte Volumenanteil des verbrannten Gases ist. Der eindimensionale Fall liefert vier Gleichungen für die acht unbekanntenen Größen $(\mathbf{r}, u, p, Y)_u$ und $(\mathbf{r}, u, p, Y)_b$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{r} \cdot u \\ \mathbf{r} \cdot e \\ \mathbf{r} \cdot Y \end{bmatrix} = f \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{r}_b \\ \mathbf{r}_b \cdot u_b \\ \mathbf{r}_b \cdot e_b \\ \mathbf{r}_b \cdot Y_b \end{bmatrix} + (1 - f) \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_u \cdot u_u \\ \mathbf{r}_u \cdot e_u \\ \mathbf{r}_u \cdot Y_u \end{bmatrix} \quad (7-65)$$

mit der einfachen Energieformel $\mathbf{r} \cdot \mathbf{e} = \frac{\rho}{g-1} + \frac{\mathbf{r}}{2} \cdot \mathbf{u}^2$. Aus den Annahmen einer stationären Flamme folgt die konstante Ausbreitungsgeschwindigkeit D_f der Flamme

$$D_f = u_u + s_u = u_b + s_b. \quad (7-66)$$

Schließlich liefern die Rankine-Hugoniot-Bedingungen für Masse, Impuls und Energie über der Flamme ($\Delta \vec{E} = D_f \cdot \Delta \vec{U}$) den konstanten Massenfluß r_s durch die Flamme

$$r_u \cdot s_u = r_b \cdot s_b \quad (7-67)$$

die Rayleigh-Gerade mit $P = \rho_b/\rho_u$ und $V = r_u/r_b$

$$\frac{P-1}{V-1} = -g \cdot Ma^2 \quad (7-68)$$

und die Volumenbeziehung

$$Y = \frac{1}{(g+1) \cdot Ma^2} \cdot (1 + g \cdot Ma^2 - \sqrt{(Ma^2 - Ma_+^2) \cdot (Ma^2 - Ma_-^2)}) \quad (7-69)$$

mit den Definitionen

$$Ma = \min(s_u/c_u, Ma_-) \quad Ma_{\pm} = \sqrt{1 + m} \pm \sqrt{m} \quad (7-70)$$

$$m = \frac{g^2 - 1}{2} \cdot \frac{Y_u \cdot Q}{c_u^2} = \frac{g+1}{2 \cdot g} \cdot \frac{Y_u \cdot Q}{c_v \cdot T_u} = \frac{g+1}{2 \cdot g} \cdot Y_u \cdot \frac{T_Q}{T_u}. \quad (7-71)$$

Die Abfrage nach dem Minimum in der Mach-Zahl sichert, daß die Flamme nicht schneller werden kann als die zugehörige CJ-Flamme. Neben den vier weiteren Gleichungen sind s_u und s_b als neue unbekannte Größen hinzugekommen. Zur Lösung des Systems werden noch zwei weitere Informationen geliefert. Aus der kompletten Verbrennung folgt der Massenbruch im Verbrannten zu

$$Y_b = 0 \quad (7-72)$$

und das vorgegebene Brenngesetz lautet

$$s_u = s_u(\vec{U}_u, t) = s_L(r_u, \rho_u, T_u, Y_u) \cdot \begin{bmatrix} s_T \\ s_L \end{bmatrix} = \mathbf{s}(t) \cdot \mathbf{s}_L, \quad (7-73)$$

wobei $s(t)$ die zeitabhängige, dimensionslose Flammenoberfläche darstellt. Damit ist das System geschlossen und kann iterativ, z.B. mittels einer Fixpunktiteration oder dem Newton-Verfahren, gelöst werden. Zusätzliche Beschränkungen, die eingehalten werden, resultieren aus der Positivität des Massenbruches

$$0 \leq Y_u \leq 1 \quad (7-74)$$

und der minimalen isobaren V_{\min} bzw. maximal möglichen Volumenausdehnung im CJ-Zustand V_{\max}

$$V_{\min} = 1 + (g-1) \cdot Q \cdot Y_u / c_u^2 \leq V \leq V_{\text{CJ}} = \frac{1}{g+1} \cdot (g + Ma_+^2) = V_{\max} \quad (7-75)$$

Erweiterung auf zwei Dimensionen

Die Erweiterung auf zwei Dimensionen erfolgt im Operator-Splitting. So wird hier lediglich die Behandlung in x -Richtung erläutert. Während im eindimensionalen Fall der verbrannte Volumenanteil durch die Flammenposition direkt berechenbar ist, wird in zwei Dimensionen die Flammengeometrie benötigt, um $f_{i,j}$ zu berechnen. Hierzu wird das skalare G -Feld auf den Zellecken der Zelle (i,j) definiert $G_{i\pm 1/2, j\pm 1/2}$. Die Flamme wird identifiziert als die Höhenlinie $G = G_0$ und wird innerhalb der Zelle als stückweise lineare Verteilung approximiert. Die Flamme schneidet die Oberflächen der Zelle und definiert somit den Flächenanteil h des verbrannten Gases. In Abbildung 7-13 sind den vier Zellflächen der Zelle (i,j) , die das Intervall $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$ definiert, vier verbrannte Zellflächenanteile h_1 bis h_4 zugeordnet, die aus der Verteilung von G bestimmt werden. Aus den Werten $h_{1,\dots,4}$ berechnet sich der verbrannte Volumenanteil $f_{i,j}$, zum Beispiel $f_{i,j} = 1/2 (h_1 + h_3)$. Aus der G -Verteilung folgt weiterhin der Normalenvektor $\vec{n}_{i,j}$ (Indizes werden der Einfachheit halber weggelassen), der durch $\vec{n} = -\nabla G / |\nabla G|$ bzw. $n_x = -G_x / \sqrt{G_x^2 + G_y^2}$ und $n_y = -G_y / \sqrt{G_x^2 + G_y^2}$ definiert ist. Die partiellen Ableitungen von G werden als Mittelwerte der Differenzenquotienten auf sich gegenüberliegenden Zellflächen approximiert

$$\begin{aligned} (G_x)_{i,j} &= \left[(G_{i+1/2, j-1/2} - G_{i-1/2, j-1/2}) + (G_{i+1/2, j+1/2} - G_{i-1/2, j+1/2}) \right] / (2 \cdot \Delta x) \\ (G_y)_{i,j} &= \left[(G_{i-1/2, j+1/2} - G_{i-1/2, j-1/2}) + (G_{i+1/2, j+1/2} - G_{i+1/2, j-1/2}) \right] / (2 \cdot \Delta y) \end{aligned} \quad (7-76)$$

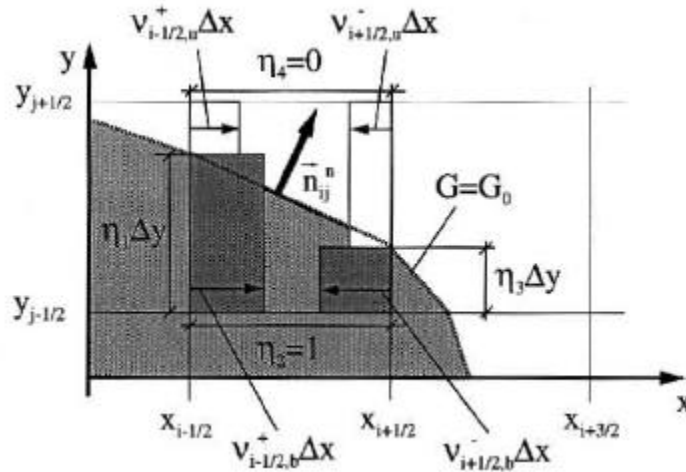


Abbildung 7-13 Verteilung der gasdynamischen Wellen in zwei Dimensionen im x-Operator-Splitting

Rekonstruktion

Zusätzlich zu Gleichung (7-65) muß die Impulserhaltung in y -Richtung

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{v} = f \cdot \mathbf{r}_b \cdot \mathbf{v}_b + (1 - f) \cdot \mathbf{r}_u \cdot \mathbf{v}_u \quad (7-77)$$

gelöst werden. Die Rekonstruktion der verbrannten und unverbrannten Zustände erfolgt nun normal zur Flamme. Dazu werden die Geschwindigkeiten u und v in die Geschwindigkeiten normal \hat{u} und tangential \hat{v} zur Flamme aufgespalten

$$\begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_x & n_y \\ -n_y & n_x \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (7-78)$$

Transformiert auf die Normalen- und Tangentialrichtung ändern sich die Erhaltungsgleichungen zu

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{r} \cdot \hat{u} \\ \mathbf{r} \cdot \hat{v} \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{e} \\ \mathbf{r} \cdot \mathbf{Y} \end{bmatrix} = f \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{r}_b \\ \mathbf{r}_b \cdot \hat{u}_b \\ \mathbf{r}_b \cdot \hat{v}_b \\ \mathbf{r}_b \cdot \mathbf{e}_b \\ \mathbf{r}_b \cdot \mathbf{Y}_b \end{bmatrix} + (1 - f) \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_u \cdot \hat{u}_u \\ \mathbf{r}_u \cdot \hat{v}_u \\ \mathbf{r}_u \cdot \mathbf{e}_u \\ \mathbf{r}_u \cdot \mathbf{Y}_u \end{bmatrix} \quad (7-79)$$

mit der einfachen Energieformel

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{e} = \frac{\rho}{g-1} + \frac{\mathbf{r}}{2} \cdot \hat{u}^2. \quad (7-80)$$

Das bedeutet, daß eine weitere Gleichung und zwei neue Unbekannte hinzukommen. Die fehlende Information wird durch die Forderung nach konstanten Tangentialgeschwindigkeiten über der Flamme

$$\hat{v}_u = \hat{v}_b = \hat{v} \quad (7-81)$$

geliefert. Die Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen bleiben dagegen unverändert und bestehen weiterhin aus Gleichung (7-67), Gleichung (7-68) und Gleichung (7-69). Mit den restlichen Vorgaben $Y_b = 0$ und dem Brenngesetz wird dieses System gelöst und die Normal- und Tangentialgeschwindigkeit zurück auf die x,y -Richtungen transformiert

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{u, b} = \begin{pmatrix} n_x & -n_y \\ n_y & n_x \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{pmatrix}_{u, b} \quad (7-82)$$

Wellenverteilung

Nach der Rekonstruktion der verbrannten und unverbrannten Zustände in sämtlichen Mischzellen werden z.B. für die Zellfläche $(i+1/2, j)$, die in einen verbrannten, $\mathbf{h}_{i+1/2, j} \Delta y$ großen Anteil ($\mathbf{h}_3 \Delta y$ in Abbildung 7-13) und einen unverbrannten, $(1-\mathbf{h}_{i+1/2, j}) \Delta y$ großen Anteil unterteilt ist, die Roe-Riemann-Probleme im Verbrannten und Unverbrannten gelöst

$$\left[\sum_p \left[\mathbf{a}_p \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2, j} \right]_{u, b} = \left[\vec{U}_{i+1, j} - \vec{U}_{i, j} \right]_{u, b} \quad (7-83)$$

Die Wellenbeiträge der Zellfläche sind dann ein flächengewichteter Mittelwert der verbrannten und der unverbrannten Wellenbeiträge

$$\begin{aligned} & \left[\left[v_p^\mp \cdot \mathbf{a}_p \pm \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2, j} = \\ & \mathbf{h}_{i+1/2, j}^n \cdot \left[\left[\left[v_p^\mp \cdot \mathbf{a}_p \pm \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2, j} \right]_b \\ & + \left[1 - \mathbf{h}_{i+1/2, j}^n \right] \cdot \left[\left[\left[v_p^\mp \cdot \mathbf{a}_p \pm \frac{1}{2} \cdot |v_p| \cdot \mathbf{a}'_p \right] \cdot \vec{R}_p \right]_{i+1/2, j} \right]_u \end{aligned} \quad (7-84)$$

Die gesamte Zustandsänderung aufgrund des Flammenfortschritts ergibt sich dann aus den Flammensprüngen der Zellen $(i-1,j)$, (i,j) und $(i+1,j)$ zu

$$(\mathbf{v}_f \cdot \Delta \vec{U}_f)_{i,j} = f_{i,j}^L (\Delta \vec{U}_f)_{i-1,j} + f_{i,j}^C (\Delta \vec{U}_f)_{i,j} + f_{i,j}^R (\Delta \vec{U}_f)_{i+1,j}. \quad (7-87)$$

Im folgenden wird die numerische Lösung der G -Gleichung vorgestellt, die zur Bestimmung der Lage der Flammenfront im numerischen Gitter herangezogen wird.

Numerische Lösung der skalaren Feldgleichung

Eigenschaften der skalaren Feldgleichung

Die Erfassung des Flammenfortschritts erfolgt durch Berechnung eines Skalars G auf dem numerischen Gitter.

Der explizite Flammenfortschritt aufgrund des Flammentransportes durch die Strömung und aufgrund der Flammenausbreitung relativ zur Strömung wird durch die Advektionsgleichung

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \vec{D}_f \cdot \nabla G = \frac{\partial G}{\partial t} + (\vec{v}_u + s_u \cdot \vec{n}) \cdot \nabla G = 0 \quad (7-88)$$

beschrieben, in der die Größe \vec{D}_f die absolute Flammenausbreitungsgeschwindigkeit $\vec{D}_f = \vec{v}_u + s_u \cdot \vec{n}$ darstellt.

Sie gilt zunächst nur für die Flammenfläche $G = G_0$. Williams /62/ interpretiert die G -Gleichung (Gleichung (7-88)) als geeignete Darstellung für den Flammenskalare $G(\vec{x}, t)$ im ganzen Strömungsfeld. Dieser Ansatz erfordert jedoch, daß fern der Flamme geeignete sinnvolle Werte der Brenngeschwindigkeit s_u im unverbrannten und s_b im verbrannten Gas definiert werden können. Dies ist im allgemeinen jedoch nicht der Fall, da alle anderen Isoflächen $G = \text{const} \neq G_0$ in keiner Weise an das Strömungsfeld koppeln. Daher besteht ein Freiheitsgrad in der Wahl einer numerisch vorteilhaften Struktur von G fern der Flamme $G = G_0$.

Für das Flammen-Rekonstruktionsverfahren notwendig ist lediglich, daß die Verteilung des Skalars G stets glatt ist, um Interpolationfehler durch große Gradienten bei der Ermittlung der Flammenposition auszuschließen. Ideen zur Erfüllung dieser Forderung an das skalare Feld findet man bei Sussman et. al (1994) /63/. Bei der Entwicklung von „level set“-Verfahren zur numerischen Behandlung von

Kontaktunstetigkeiten (wie z.B. Gasblasen in Flüssigkeiten) wird das skalare Feld entsprechend der Transportgeschwindigkeit durch die Strömung verformt. Der Forderung nach einer glatten Verteilung von G wird dadurch nachgekommen, daß $G(\vec{x}, t)$ als Abstandsfunktion von G_0 definiert wird und zu jeder Zeit die zweite zu lösende Gleichung

$$|\nabla G| = 1 \quad (7-89)$$

die G -Verteilung für $G \neq G_0$ definiert. Diese Gleichung besagt, daß der Normalenabstand dx_n zweier Isoflächen G und $G + dG$ gleich ist der Differenz der G -Werte dG , wie bereits oben beschrieben wurde.

Die numerische Kombination der beiden Gleichungen (G -Gleichung und Abstandsfunktion) erfordert einen endlichen Übergangsbereich. Obwohl die G -Gleichung nur an der Flammenfläche $G = G_0$ definiert ist, wird sie nahe der Flamme in einem endlichen Bereich um $G = G_0$ gelöst. Durch diese Vorgabe ist es möglich, für die Lösung der G -Gleichung effiziente Standardverfahren, die in Anlehnung an stoßauflösende Verfahren entwickelt wurden, anzuwenden. Diese Verfahren auf der Basis von level sets garantieren den korrekten Transport der Isoflächen, ohne die genaue Position von $G = G_0$ zu ermitteln und einzelne Punkte der Front direkt zu verfolgen, was einem Tracking-Verfahren gleich käme. In einem zweiten Schritt wird die Gleichung der Abstandsfunktion außerhalb des endlichen Bereichs gelöst.

Lösung der G -Gleichung

Die Besonderheit der G -Gleichung ist, daß sie die Form der Hamilton-Jacobi-Gleichung besitzt. Darauf bauen Lösungsansätze auf, die in den Veröffentlichungen von Osher und Sethian /52/, /53/ nachgelesen werden können. In diesen Arbeiten werden bekannte, stoßauflösende Verfahren zur Lösung herangezogen.

Hier soll jedoch von der bereits bekannten hyperbolischen nicht-konservativen Form

$$G_t + \vec{D}_f \cdot \nabla G = 0 \quad (7-90)$$

ausgegangen werden. Diese wird im Richtungs-Operator-Splitting mit der entsprechenden Komponente der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit $D = u_u + sn_x$ bzw. $D = v_u + sn_y$ für die x - bzw. y -Richtung gelöst:

$$G_t + DG_x = 0. \quad (7-91)$$

Hier sind n_x, n_y die Komponenten des Normalenvektors in den jeweiligen Richtungen. Die Diskretisierung erfolgt auf den Ecken der Zellen, an denen die G -Werte definiert

sind. Hierzu müssen geeignete Werte der Geschwindigkeiten D , die nur im rekonstruierten Zellzentrum definiert sind, den Zellecken zugeordnet werden. Zur Lösung wird ein einfaches Diskretisierungsschema erster Ordnung, welches das Vorzeichen der Transportgeschwindigkeit berücksichtigt („upwind“), benutzt. Zur Vereinfachung sind nur die Indizes für die x -Richtung dargestellt:

$$G_{i+1/2}^{n+1} = G_{i+1/2}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot \left[D_{i+1/2}^+ \cdot \left[G_{i+1/2}^n - G_{i-1/2}^n \right] + D_{i+1/2}^- \cdot \left[G_{i+3/2}^n - G_{i+1/2}^n \right] \right]. \quad (7-92)$$

Der Transport von Gradienten von G erfolgt entsprechend dem Vorzeichen der Geschwindigkeit D mit der Definition

$$D_{i+1/2}^+ = \max(0, D_{i+1/2}) \quad D_{i+1/2}^- = \min(0, D_{i+1/2}) \quad (7-93)$$

Die Zuordnung der Geschwindigkeiten von den rekonstruierten Werten im Zellzentrum $D_{i,j}$ auf die Zellecken $D_{i+1/2,j+1/2}$ erfolgt entsprechend dem geringsten Abstand eines Flammensegments zur jeweiligen Zellecke. Eine Zellecke $(i+1/2, j+1/2)$ ist in Abbildung 7-15 durch ausgefüllte Kreise gekennzeichnet und kann von maximal vier Mischzellen $(i,j), (i+1,j), (i,j+1), (i+1,j+1)$, in denen jeweils eine Flamme mit der Flammengeschwindigkeit $D_{i,j}, D_{i+1,j}, D_{i,j+1}, D_{i+1,j+1}$ rekonstruiert würde, umgeben sein, die ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit bestimmen. Eine einfache, sinnvolle Wahl, die vorgenommen wurde, setzt $D_{i+1/2, j+1/2}$ gleich der Flammengeschwindigkeit in der Zelle mit dem kürzesten Abstand der Flamme zur betrachteten Zellecke. Liegt die Zellecke z.B. im Verbrannten bzw. Unverbrannten, so ist der Volumenanteil des Verbrannten f bzw. des Unverbrannten $1-f$ ein Maß für den Abstand (siehe Abbildung 7-15).

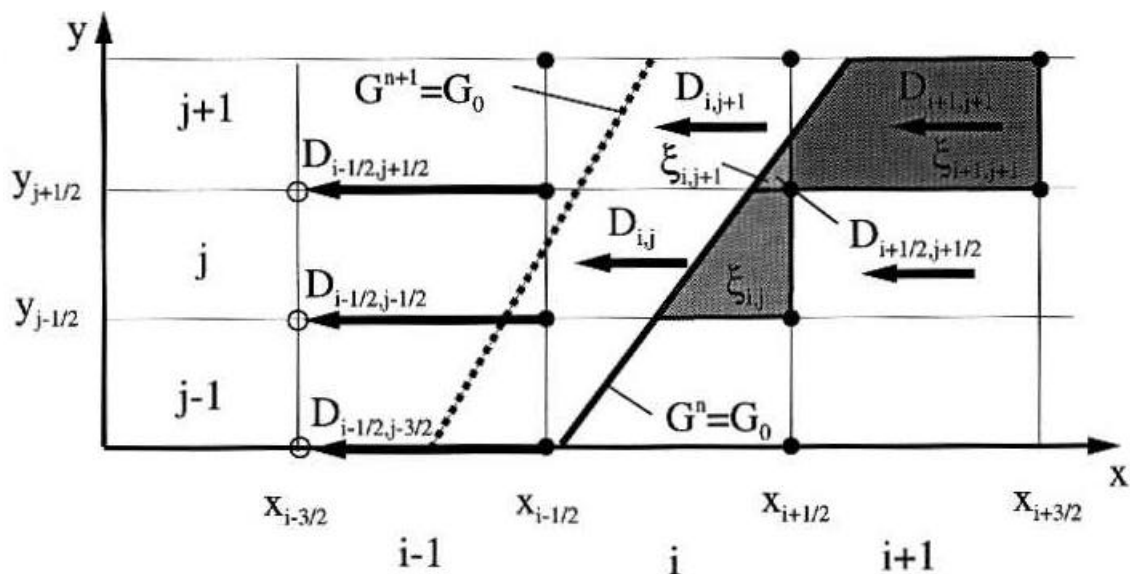


Abbildung 7-15 Expliziter Flamentransport mit Zuordnung der Geschwindigkeiten an den Zellecken und Berücksichtigung des Überschreitens der Flamme über Zellecken

$$\begin{aligned}
G_{i+1/2,j+1/2} &> G_0, \quad D_{i+1/2,j+1/2} = D_{m,n}, \\
f_{m,n} &= \min(f_{i,j}, f_{i+1,j}, f_{i,j+1}, f_{i+1,j+1}) \\
G_{i+1/2,j+1/2} &< G_0, \quad D_{i+1/2,j+1/2} = D_{m,n}, \quad f_{m,n} = \max(f_{i,j}, f_{i+1,j}, f_{i,j+1}, f_{i+1,j+1})
\end{aligned}
\tag{7-94}$$

Die komplette Darstellung der Flammenfront innerhalb einer Zelle (i,j) durch Interpolation der G -Werte erfordert mindestens drei Zelleckenwerte. Beim Übergang eines Flammensegmentes über eine Zellecke kann aus einer ursprünglich verbrannten bzw. unverbrannten Zelle eine Mischzelle werden. In Abbildung 7-15 sind dies die Zellen $(i-1,j-1)$ und $(i-1,j)$, die im neuen Zeitschritt Mischzellen sind. Den Zellecken $(i-3/2,j-3/2)$, $(i-3/2,j-1/2)$ und $(i-3/2,j+1/2)$, die in Abbildung 7-15 durch nicht ausgefüllte Kreise gekennzeichnet sind, werden die Geschwindigkeitswerte der Nachbarn, die von der Flamme überstrichen werden, zugeordnet

$$\begin{aligned}
D_{i-3/2,j-3/2} &= D_{i-1/2,j-3/2} \\
D_{i-3/2,j-1/2} &= D_{i-1/2,j-1/2} \\
D_{i-3/2,j+1/2} &= D_{i-1/2,j+1/2}
\end{aligned}
\tag{7-95}$$

Damit sind die notwendigen Informationen bereitgestellt. Diese Formulierung ist nur von erster Genauigkeitsordnung, da die Geschwindigkeiten nur bei der Flamme selbst definiert sind, was bei den Arbeiten von Osher und Sethian stets durch die Vorgabe einer Ausbreitungsgeschwindigkeit umgangen wird. Somit können dort Verfahren höherer Ordnung direkt übertragen werden. In diesem Fall jedoch würde eine Erweiterung auf zweite Ordnung das Einbeziehen von Querableitungen tangential zur Flamme erfordern. Zusätzlich würde eine zweite Flammenrekonstruktion nötig, um auch zeitlich auf die zweite Genauigkeitsordnung zu kommen. Trotz der ersten Genauigkeitsordnung können die grundlegenden Eigenschaften des Rekonstruktionsverfahrens bereits deutlich gemacht werden.

Lösung der Abstandsfunktion

Die Abstandsfunktionsgleichung

$$|\nabla G| = 1 \tag{7-96}$$

bewirkt, daß $G-G_0$ gleich dem normalen Abstand des Punktes mit dem Wert G von der Isofläche G_0 ist, und wird für Punkte außerhalb der Flammenzone gelöst. Die Flammenzone erstreckt sich jeweils eine Zellenweite ins Unverbrannte und Ver-

brannte und beinhaltet noch die Zellecken, die durch den Übergang der Flamme in eine unverbrannte oder verbrannte Zelle zu Zellecken einer neuen Mischzelle werden. Für die restlichen Zellecken werden die G -Werte entsprechend ihres normalen Abstands von $G = G_0$ geglättet.

Sussman et al. /63/ lösen zunächst die G -Gleichung mit der Strömungsgeschwindigkeit, die im ganzen Feld wohldefiniert ist, und lösen im Anschluß die Gleichung für die Abstandsfunktion ebenfalls für das gesamte Feld. Danach soll die Position \tilde{x}_f der Fläche $G = G_0$ durch die Reinitialisierung unbeeinträchtigt bleiben. Dies kann theoretisch gezeigt werden. Numerisch allerdings kann die Beibehaltung der korrekten Flammenposition nicht garantiert werden (siehe Sussman et al. /64/). Somit werden nur die Punkte außerhalb der Flammenzone, wobei die Punkte innerhalb der Flammenzone als Randbedingung benutzt werden, berechnet. Die Differentialgleichung

$$1 - |\nabla G| = 0 \quad (7-97)$$

wird aus praktischen Gründen modifiziert zu

$$G_t = S(G^{\text{ex}}) \cdot (1 - |\nabla G|) = S(G^{\text{ex}}) \cdot (1 - \sqrt{G_x^2 - G_y^2}) \quad (7-98)$$

und wird iterativ in zwei Dimensionen bis zum stationären Zustand $G_t = 0$ gelöst.

Hier bedeutet G^{ex} die G -Verteilung nach der Lösung des expliziten Transports, wie er im vorigen Kapitel beschrieben wurde. In dieser Verteilung sind lediglich die Punkte innerhalb der Flammenzone verändert. Die Position der Flamme $G^{\text{ex}} = G_0$ ist ausschlaggebend für die Funktion $S(G^{\text{ex}})$, die das Vorzeichen von G^{ex} wiedergibt. Zu numerischen Zwecken wird diese Vorzeichenfunktion mit einem kleinen numerischen Wert ϵ durch den Ansatz

$$S(G^{\text{ex}}) = \frac{G^{\text{ex}} - G_0}{\sqrt{(G^{\text{ex}} - G_0)^2 - \epsilon^2}} \quad (7-99)$$

modifiziert, wodurch Störungen von $|\nabla G| - 1 \neq 0$ stets in Richtung $|\nabla G| - 1 = 0$ zurückgeglättet werden. Schreibt man die Iterationsgleichung (Gleichung (7-98)) um zu

$$G_t + \vec{w} \cdot \nabla G = S(G^{\text{ex}}) \quad \vec{w} = S(G^{\text{ex}}) \cdot (\nabla G / |\nabla G|), \quad (7-100)$$

so erkennt man die nichtlineare hyperbolische Gleichung mit den durch den Vektor \vec{w} gegebenen Charakteristiken. Der Vektor \vec{w} ist ein Normalenvektor, der stets weg von $G = G_0$ zeigt. Informationen breiten sich stets von der Flamme mit der Geschwindigkeit \vec{w} aus.

Weitere Informationen zur Diskretisierung der Gleichung (7-98) finden sich bei /13/. Die neu berechnete G -Verteilung stimmt an der Flamme mit der expliziten überein $G^{n+1} = G^{ex}$ und fern der Flamme konvergiert G aufgrund von $G_t = 0$ zu $|\nabla G| = 1$ und somit zum tatsächlichen Abstand.

7.5 Zusammenfassung

Das Kapitel gibt zunächst einen Überblick über die wesentlichen Elemente von numerischen Lösungsverfahren. Die grundlegenden Erhaltungsgleichungen werden vorgestellt und ihre Diskretisierung kurz diskutiert. Im SFB 224 wurden sowohl kommerzielle Programmpakete eingesetzt, wie auch Rechenprogramme selbst entwickelt. Erstere dienten als Ausgangspunkt für die Implementierung verbesserter Modelle für die Simulation des Wärmeübergangs im Zylinder oder die Berechnung der Strahlausbreitung, der Zerstäubung und der Verdampfung von Kraftstoff oder der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in Dieselmotoren. Die in den kommerziellen Programmen implementierten Lösungsverfahren stellen als Grundlage solcher Arbeiten einen geeigneten Ausgangspunkt dar. Detaillierte Untersuchungen der kalten Strömung in den Einlaßkanälen und der Ventilumströmung im Motor sowie der Wirbeldynamik bis zum Ende des Kompressionstaktes wurden dagegen mit vollständig eigenentwickelter Software durchgeführt. Besondere numerische Anforderungen an das Lösungsverfahren bereitet auch die Berechnung der Ausbreitung vorgemischter Flammen. Da die sehr dünnen Flammenstrukturen mit vertretbarem Aufwand numerisch nicht aufgelöst werden können, sind zwei neue numerische Verfahren entwickelt worden, bei denen die Flamme als Diskontinuität im Strömungsfeld aufgefaßt wird. Der Beschreibung dieser Verfahren ist der größte Teil dieses Kapitel gewidmet.

7.6 Abbildungsverzeichnis

- Abbildung 7-1: Diskretisierung der 1-D Eulergleichungen in Raum und Zeit
- Abbildung 7-2: Zentrale und upwind Diskretisierung
- Abbildung 7-3: Flußberechnung beim Verfahren von Godunov und von Roe
- Abbildung 7-4: Positionen der Geschwindigkeitsvektoren (links), Prinzip des Konvektionsalgorithmus (rechts)
- Abbildung 7-5: Testrechnungen für Konvektionsalgorithmen
- Abbildung 7-6: Prinzip des Ausbreitungsalgorithmus
- Abbildung 7-7: Testrechnung für Ausbreitungsalgorithmen
- Abbildung 7-8: Schematische Darstellung eines Volumenelementes aus dem Entrainment-Modell
- Abbildung 7-9: Schematische Darstellung der Positionierung und der Verteilung der Quellterme
- Abbildung 7-10: Flammen-Riemann-Problem
- Abbildung 7-11: Flammen-Tracking in 1-D
- Abbildung 7-12: Wellenverteilung beim Flammen-Rekonstruktionsverfahren
- Abbildung 7-13: Verteilung der gasdynamischen Wellen in zwei Dimensionen im x-Operator-Splitting
- Abbildung 7-14: Wellenverteilung der Flamme in zwei Dimensionen im x-Operator-Splitting
- Abbildung 7-15: Expliziter Flammentransport mit Zuordnung der Geschwindigkeiten an den Zellecken und Berücksichtigung des Überschreitens der Flamme über Zellecken

7.7 Literatur

- /1/ R.D. Richtmyer, K.W. Morton: „Difference Methods for Initial Value Problems“, 2nd Edition, Interscience, New York, 1967
- /2/ P.J. Roache: „Computational Fluid Dynamics“, Hermosa, Albuquerque, New Mexico, 1972
- /3/ S.V. Patankar: „Numerical Heat Transfer and Fluid Flow“, Hemisphere, Washington, D.C., 1980
- /4/ R. Peyret, T.D. Taylor: „Computational Methods for Fluid Flow“, Springer, New York, 1983
- /5/ D.A. Anderson, J.C. Tannehill, R.H. Pletcher: „Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer“, Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1984
- /6/ C. Hirsch: „Numerical Computation of Internal and External Flows“, Vol. 1 Fundamentals of Numerical Discretization, Wiley Sons: Chichester, New York, 1988
- /7/ C. Hirsch: „Numerical Computation of Internal and External Flows“, Vol. 2 Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows, Wiley Sons: Chichester, New York, 1988
- /8/ U. Bielert, M. Klug, G. Adomeit: „Numerical Simulation of the Turbulent Combustion Process in a Rapid Compression Device“, SAE Paper 940211, 1994
- /9/ U. Bielert: „Numerische Simulation turbulenter Verbrennungsvorgänge unter motorischen Bedingungen mit einem Front Tracking Verfahren“, Fortschr.-Ber. VDI Reihe 12 Nr. 223
- /10/ U. Bielert, M. Klug, G. Adomeit: „Application of Front Tracking Techniques to the Turbulent Combustion Processes in Single Stroke Engine“, Combustion and Flame, 1996
- /11/ V. Smiljanovski, R. Klein: „Flame Front Tracking via In-cell Reconstruction“, Proceedings of the Fifth International Conference on Hyperbolic Problems, Theory, Numerics, and Applications, Stony Brooks, New York, 1995.
- /12/ V. Smiljanovski, R. Klein: „Simulation of Gasdynamic Flame Instability and DDT Using In-cell Reconstruction“, Proceedings of the Sixth International Symposium on Computational Fluid Dynamics, Lake Tahoe, Nevada, September 4-8, 1995
- /13/ D. Adalsteinsson, J.A. Sethian: „A Fast Level Set Method for Propagating Interfaces“, Journal of Computational Physics 118, 269-277, 1995
- /14/ V. Smiljanovski: „Ein numerisches Verfahren zur Berechnung schneller Vormischflammen und der Deflagrations-Detonations-Transition (DDT)“, Dissertation RWTH Aachen, 1996
- /15/ P.D. Thomas, C.K. Lombard: „Geometric Conservation Law and Its Application to Flow Calculations on Moving Grids“, AIAA, 17, 1979

-
- /16/ Y. Tamura, K. Fujii: „Conservation Law for Moving and Transformed Grids“, 11. AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 6-9 July, 1993
- /17/ K. Dortmann: „Numerische Simulation instationärer Profilmströmungen“, Dissertation, RWTH Aachen, 1989
- /18/ M.G. Hall: „Cell-vertex multigrid schemes for solution of the Euler equations“, Numerical methods for fluid dynamics II, Eds K.W. Morton and M.J. Baines, Clarendon Press, 303-345, 1986
- /19/ G. Strang: „On the Construction and Comparison of Difference Schemes“, SIAM, J. Num. Anal., 5, 506-517, 1968
- /20/ P.D. Lax, B. Wendroff: „Systems of conservation laws“, Comm. Pure and Appl. Math., 13, 217-237, 1960
- /21/ A. Harten, P.D. Lax, B. van Leer: „On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws“, SIAM Rev., 25, 35-62, 1983
- /22/ B. Einfeldt: „On Godunov-Type Methods for Gas Dynamics“, SIAM, J. Num. Anal., 25, No. 2, 1988
- /23/ B. Einfeldt: „Zur Numerik der stoßauflösenden Verfahren“, Dissertation, RWTH Aachen, 1988
- /24/ S.K. Godunov: „Finite-Difference Method for Numerical Computation of Discontinuous Solutions of the Equations of Fluid Dynamics“, Mat. Sbornik 47, 271-306, 1959
- /25/ P.L. Roe: „Approximate Riemann-Solvers, Parameter Vectors and Difference Schemes“, J. Comp. Phys., 43, 357-372, 1981
- /26/ A. Harten: „High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws“, J. Comp. Phys., 49, 357-393, 1983
- /27/ P.K. Sweby: „High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws“, SIAM J. Num. Anal., 21, pp. 995-1011, 1984
- /28/ A. Harten: „On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes“, SIAM J. Numer. Anal., 21, 1-23, 1984
- /29/ R. Courant, K.O. Friedrichs: „Supersonic Flows and Shock Waves“, Interscience Publishers, New York, 1948
- /30/ J.M. Hyman: „Numerical Methods for Tracking Interfaces“, Physica 12D, 12: 396-407, 1984, North-Holland, Amsterdam
- /31/ W.T. Ashurst, P.K. Barr: „Stochastic Calculation of Laminar Wrinkled Flame Propagation via Vortex Dynamics“, Comb. Sci. and Tech. 34:227-256, 1983
- /32/ P.K. Barr: „Acceleration of a Flame by Flame-Vortex Interactions“, Combustion and Flame 82:111-125, 1990
- /33/ A.J. Chorin: „Flame Advection and Propagation Algorithms“, Journ. of Comp. Physics 25:253-272, 1977

-
- /34/ A.J. Chorin: „Random Choise Methods with Application to Reacting Gas Flow“, Journ. of Comp. Physics 25:253-272, 1977
- /35/ A.J. Chorin: „Random Choise Solution of Hyperbolic Systems“, Journ. of Comp. Physics 22:517-533, 1976
- /36/ E.G. Groff: „An Experimental Evaluation of an Entrainment Flame-Propagation Model“, Combustion and Flame 67:153-162, 1987
- /37/ E. Tomita, Y. Hamamoto: „The Effect of Turbulence on Combustion in Cylinder of Spark-Ignition Engine - Evaluation of Entrainment Model“, SAE Paper 880128, 1988
- /38/ C.W. Hirt, B.D. Nichols: „Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries“, Journ. of Comp. Physics 39:201-225, 1981
- /39/ N. Ashgriz, J.Y. Poo: „FLAIR: Flux Line-Segment Model for Advection and Interface Reconstruction“, Journ. of Comp. Physics 93:449-468, 1991
- /40/ W.F. Noh, P. Woodward: „SLIC (Simple Line Interface Calculation)“, in Lecture Notes in Physics, vol. 59; Proc. Fifth. Int. Conf. on Numerical Methods in Fluid Dynamics, A.I. van de Vooren and P.J. Zandbergen, eds. (Springer-Berlin), 1976
- /41/ P.K. Barr, W.T. Ashurst: „An Interface Scheme for Turbulent Flame Propagation“, Sandia Report SAND82-8773, Sandia National Laboratories, 1982
- /42/ R.J. Tabaczynski, F.H. Trinker, B.A.S. Shannon: „Further Refinement and Validation of a Turbulent Flame Propagation Model for Spark-Ignition Engines“, Combustion and Flame 39:111-121, 1980
- /43/ W.T. Ashurst: „The Structure of Turbulence and Its Effect Upon Flames“, Lecture at the ERCOFTAC Summer School, European Research Community On Flow Turbulence And Combustion, Aachen, 1992
- /44/ A.F. Ghoniem, O.M. Knio: „Numerical Simulation of Flame Propagation in Constant Volume Chambers“, 21st Symp. (Int.) on Combustion, 1313-1320, 1986
- /45/ J. Sethian: „Turbulent Combustion in Open and Closed Vessels“, Journ. of Comp. Physics 54:425-456, 1984
- /46/ A.F. Ghoniem, A.J. Chorin, A.K. Oppenheim: „Numerical Modeling of Turbulent Combustion in Premixed Gases“, 18th Symp. (Int.) on Combustion, 1375-1383, 1981
- /47/ R.J. Cattolica, P.K. Barr, N.N. Mansour: „Propagation of a Premixed Flame in a Divided-Chamber Combustor“, Combustion and Flame 77:101-121, 1989
- /48/ P.K. Barr, P.O. Witze: „Some Limitations to the Spherical Flame Assumption lised in phenomenological Engine Models“, SAE Paper 880129, 1988
- /49/ I. Chern, P. Colella: „A conservative front tracking method for hyperbolic conservation laws“, Preprint UCRL-97200, Lawrence Livermore National Laboratory, 1987

-
- /50/ A. Bourlioux: „Numerical Study of Unstable Detonations“, Dissertation, Princeton University, Juni 1991
- /51/ A. Bourlioux, A. Majda: „Theoretical and Numerical Structure for Unstable Two-Dimensional Detonations“, *Combustion and Flame*, 90, 211-229, 1992
- /52/ S. Osher, J.A. Sethian: „Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations“, *Journal of Computational Physics*, 79, 12-49, 1988
- /53/ J.A. Sethian: „Curvature and the Evolution of Fronts“, *Commun. Math. Phys.*, 101, 487-499, 1985
- /54/ C. Rhee, L. Talbot, J.A. Sethian: „Dynamical Behavior of a Premixed Turbulent Open V-Flame“, Report PAM-599, Center for Pure and Applied Mathematics, University of California, Berkeley, January 1994
- /55/ C. Rhee, L. Talbot, J.A. Sethian: „Dynamical Study of a Premixed V flame“, *Jour. Fluid Mech.*, 300, pp.87-115, 1995
- /56/ R.J. LeVeque, K.M. Shyue: „Shock Tracking Based on High Resolution Wave Propagation Methods“, Research Report No. 91-02, February 1992, Department of Applied Mathematics, University of Washington
- /57/ K.M. Shyue: „Front Tracking Methods Based on Wave Propagation“, Research Report No. 93-02, June 1993, Department of Applied Mathematics, University of Washington
- /58/ R.J. LeVeque: „A large time step generalization of Godunov's method for Systems of conservation laws“, *SIAM J. Numer. Anal.*, 22, pp. 1051-1073, 1985
- /59/ R.J. LeVeque: „Shock tracking with the large time step method“, in *Proc. 7th Intl. Conf. Comput. Meth. in Appl. Sci. Eng.*, R. Glowinski and J.-L. Lions, eds., Versailles, 1985
- /60/ R.J. LeVeque: „High Resolution Finite Volume Methods on Arbitrary Grids via Wave Propagation“, *J. Comp. Phys.*, 78, 36-63, 1988
- /61/ Z.H. Teng, A.J. Chorin, T.P. Liu: „Riemann Problems for Reacting Gas“, with Application to Transition, *Siam J. Appl. Math*, Vol. 42, No. 5, October 1982
- /62/ F.A. Williams: „Turbulent combustion“, in *The Mathematics of Combustion*, J.D. Buckmaster (ed.), SIAM, 97-131, 1985
- /63/ M. Sussman, P. Smereka, S. Osher: „A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow“, *Journal of Computational Physics*, 114, 146-159, 1994
- /64/ M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, S. Osher: „A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow II“, *Proceedings of the Sixth International Symposium on Computational Fluid Dynamics*, Lake Tahoe, Nevada, September 4-8, 1995