Technische Universität Chemnitz

Sonderforschungsbereich 393

Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern

Stefan Meinel

Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl

Preprint SFB393/00-16

Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393

SFB393/00-16 **März 2000**

Inhaltsverzeichnis

Adresse des Autors:

Stefan Meinel
TU Chemnitz
Fakultät für Mathematik
D-09107 Chemnitz

`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/`

1 Einleitung

Bei der Untersuchung von Strömungs- und Transportvorgängen, die sich aus praktischen Problemstellungen ergeben, spielen häufig Dichteunterschiede im Fluid eine wesentliche physikalische Rolle. Als Ursachen für interne Schwankungen der Dichte kommen Temperaturunterschiede, Inhomogenitäten der stofflichen Zusammensetzung und Druckdifferenzen in Betracht. Falls niedrige Strömungsgeschwindigkeiten vorliegen (man kann dies anhand einer Machzahl, die wesentlich kleiner als 1 ist, kennzeichnen), treten i.a. nur relativ geringe Druckunterschiede auf. Solchen Strömungen, deren Dichteveränderlichkeit nur auf Temperaturunterschiede oder/und auf die stoffliche Zusammensetzung zurückzuführen ist, fehlt das klassische Merkmal der *kompressiblen* Strömungen, die allgemein mit höheren Machzahlen ($M > 0.1...0.3$) in Zusammmenhang gebracht werden.
Die diskutierten Dichteabhängigkeiten sind sowohl bei Gasen als auch bei Flüssigkeiten zu beobachten. Typische Vertreter für diese Problemklasse sind Vorgänge, die von chemischen Reaktionen begleitet werden (z.B. auch Verbrennungsvorgänge), konvektive und diffusive Mischungsvorgänge und auftriebsinduzierte Strömungen. Lokale Temperaturdifferenzen von $\sim 10^3 K$ sowie das Auftreten von Mischungskomponenten mit unterschiedlichen Molekulargewichten können Variationen der Gesamtdichte im Lösungsgebiet um den Faktor 10 und mehr bewirken.
Bezüglich der traditionell klar voneinander abgegrenzten Arbeitgebiete der numerischen Behandlung kompressibler und der inkompressibler Strömungen nimmt die Aufgabenklasse eine Zwischenstellung ein. Obgleich formal eine Zuordnung zu den kompressiblen Vorgängen vorliegt, weisen die Strömungen mit kleinen Machzahlen (engl.: low Mach number flows) Eigenschaften auf, die sie zur Behandlung mit den Methoden der inkompressiblen Strömungssimulation prädestinieren.
Zur Berechnung von Strömungsvorgängen mit *geringen* Dichteunterschieden werden ohnehin vorwiegend die Algorithmen für inkompressible Vorgänge eingesetzt, wobei die Wirkung der veränderlichen Dichte durch eine äußere Kraft in der Impulsgleichung modelliert wird (Boussinesq - Approximation). Hierbei wird ein Modellfehler [1] in Kauf genommen werden, der mit steigender Dichtedifferenz deutlich anwächst. Bei großen Schwankungen der Dichte im Lösungsgebiet oder wenn die Dichtevariation relevante Rückwirkungen auf den Gesamtvorgang zeigt, ist diese stark vereinfachende Vorgehensweise daher nicht akzeptabel.
Da eine direkte numerische Abbildung der physikalischen Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie der Behandlung des allgemeinen kompressiblen Strömungsfalles entsprechen würde, ist es notwendig, eine (die Allgemeinheit einschränkende) Beschreibung der Besonderheiten der Vorgänge mit niedriger Machzahl anzugeben. Geeignete Ansätze zur spezifischen Modellierung des Strömungsverhaltens für kleine Machzahlen, jedoch bei starken Dichteänderungen, wurden erstmals in den achtziger Jahren u.a. in Zusammenhang mit Arbeiten zur Verbrennungssimulation vorgestellt ([P82], [MS85], [ChP86]). Durch eine Aufspaltung des Druckes in einen thermodynamischen und einen hydrodynamischen

[1] Untersuchungen thermisch getriebener Stömungen haben gezeigt ([BP92]), daß bei Wasser bereits ein Temperaturunterschied von $2^o K$ und bei Luft von $15^o K$ ausreicht, um Fehler von 1% zu verursachen.

Anteil bleibt der Charakter des inkompressiblen Modelles als Differentialgleichungssystem mit Nebenbedingung erhalten. Die Einbeziehung der variablen Dichte in alle Bilanzgleichungen erhöht jedoch die Komplexität des Modelles und verstärkt die Kopplung zwischen den einzelnen Gleichungen. Es stellt sich daher die Frage, inwieweit Algorithmen, die für inkompressible Strömungs- und Transportvorgänge entwickelt wurden und dort effektiv arbeiten, auf das komplexere Modell der Vorgänge mit niedrigen Machzahlen übertragen werden können.

Im Kapitel 2 stehen zunächst Aspekte der Modellbildung im Mittelpunkt. Es werden außerdem Methoden zur Ermittlung des thermodynamischen Druckes diskutiert.
Bei der numerischen Rechnungen gewonnene Erfahrungen zeigen, daß in bestimmten Fällen, trotz veränderlicher Dichte, nahezu divergenzfreie Geschwindigkeitsfelder auftreten. Das Kapitel 3 versucht eine Antwort auf die Frage zu geben, inwieweit diese Eigenschaft aus der Sicht der Modellbildung begründet ist.
Die numerische Behandlung der untersuchten Modelle steht im Mittelpunkt des Kapitels 4. Es werden Verallgemeinerungen eines für inkompressible Strömungen konzipierten Projektionverfahrens für die betrachtete Aufgabenstellung beschrieben. Eine sehr wichtige Frage ist hierbei, aus welcher stetigen Gleichung sich die diskrete Projektionsbedingung ableitet. Es kommen verschiedene Varianten, die durch Umformungen aus der Kontinuitätsgleichung gewonnen werden, sowie eine Methode unter Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder in Betracht. Eine wesentliche Rolle spielt in diesem Zusammenhang die Lösung des linearen Gleichungssystems zur Berechnung der Druckkorrektur, einschließlich zugehöriger Lösbarkeitbedingungen. Weitere Untersuchungen betreffen stabilisierte Diskretisierungen für skalare Transportgleichungen bei veränderlicher Dichte.
In einem Abschnitt 5 werden abschließend die Ergebnisse von numerischen Testrechnungen anhand der konvektiv-diffusiven Vermischung zweier Gase und einer Diffusionsflamme präsentiert und diskutiert.

2 Modellierung von Strömungsvorgängen mit erheblichen Dichtevariationen und kleiner Machzahl

Die mathematisch korrekte Beschreibung von Strömungsvorgängen mit veränderlicher Dichte ist durch die vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen gegeben, ggf. ergänzt durch skalare Transportgleichungen für die Energie und Spezieskonzentrationen sowie die thermodynamischen Relationen.
Unter Zugrundelegung einiger physikalischer Annahmen, wie einer laminaren Strömung, Gültigkeit der thermodynamischen Zustandsgleichungen für ideale Gase, Betrachtung eines Gemisches mit bekannten Diffusionskoeffizienten D_k, sowie entsprechend vorgegebener Ansätze für die Quellglieder und für den Wärmestromvektor $\vec{q}$ erhält das beschreibende System partieller Differentialgleichungen die folgende Form:

$$
\begin{aligned}
\varrho\left\{\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}+(\vec{v}\cdot\nabla)\,\vec{v}\right\} &= -\nabla p+\nabla\cdot\left\{\eta\left(\nabla\vec{v}+(\nabla\vec{v})^{\top}\right)\right\} \\
&\quad -\frac{2}{3}\nabla\cdot\{\eta\,(\nabla\cdot\vec{v})\,I\}+\varrho\vec{f}\,, \qquad (1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\nabla\cdot(\varrho\vec{v}) &= 0\,, && (2)\\
\varrho\left\{\frac{\partial e}{\partial t}+(\vec{v}\cdot\nabla)\,e\right\} &= -p\nabla\cdot\vec{v}-\nabla\cdot\vec{q}+Q && (3)\\
\varrho\left\{\frac{\partial y_k}{\partial t}+(\vec{v}\cdot\nabla)\,y_k\right\} &= \nabla\cdot\{\varrho\,D_k\,\nabla y_k\}+q_k\,, \qquad k=1,\ldots,N && (4)\\
\varrho = \frac{p}{RT} &= \frac{p\bar{M}}{R^{*}T} \qquad \textit{wobei} \quad \bar{M}=\left(\sum_{k=1}^{N}\frac{y_k}{M_k}\right)^{-1} && (5)\\
e &= e_0+c_v(T-T_0) && (6)
\end{aligned}
$$

Für die Spezieskonzentrationen y_k und die zugehörigen Quellglieder gilt:

$$
\sum_{k=1}^{N} y_k = 1 \qquad \sum_{k=1}^{N} q_k = 0
$$

Für die numerische Behandlung der *vollständigen kompressiblen* Gleichungen stehen entwickelte explizite und implizite Verfahren bereit, die jedoch für den Grenzfall kleiner Machzahlen meist sehr ineffektiv arbeiten. Die Gründe für dieses Verhalten liegen in der hohen Steifigkeit des Systems herrührend aus der wachsenden Diskrepanz zwischen der Ausbreitungsgeschwindigkeit von akustischen Wellen (mit Schallgeschwindigkeit) und der Ausbreitung aller anderen Informationen (mit Fluidgeschwindigkeit).
Diese Eigenschaft kann auch aus der Sicht der Berechnung von kompressiblen Strömungen mit hoher oder moderater Machzahl ein ernsthaftes Problem bedeuten, wenn lokal im Lösungsgebiet Bereiche mit niedriger Geschwindigkeit eingebettet sind.
Zum Schließen der sich zeigenden Lücke zwischen den Algorithmen für inkompressible und kompressible Probleme kommen zwei grundsätzliche Strategien zur Anwendung:

- *Vorkonditionierung* des Systems der Erhaltungsgleichungen für die kompressiblen Strömungen.
- Betrachtung einer *Approximation* der Erhaltungsgleichungen für den Grenzfall kleiner Machzahlen.

Die erstgenannte Strategie bewahrt die Universalität der Methode für Probleme mit beliebigen Machzahlen und eignet sich u.a. für die Untersuchung von kompressiblen Problemen mit eingebetteten Zonen niedriger Geschwindigkeit. Um die Konverenz der eingesetzten Iterationsverfahren (z.B. GMRES) zu gewährleisten, werden für diese Problemklasse Vorkonditionierungstechniken für die Massenmatrizen angewandt. Hierzu wird eine

Pseudozeitableitung im Gleichungssystem eingeführt und mit einem Vorkonditionierungsoperator multipliziert, der die auftretenden Skalenunterschiede ausgleicht (siehe z.B. [T87]). In neueren Arbeiten werden auch viskose Einflüsse bei der Konstruktion dieser Vorkonditionierung berücksichtigt ([CM93],[NSIT98]).
Für zeitabhängige Probleme kommt ein sogenanntes “dual time stepping “- Verfahren zur Anwendung, wobei die physikalische Zeitableitung (meist implizit) als Quellglied im System behandelt wird. In jedem physikalischen Zeitschritt ist dann die Konvergenz des Systems zum stationären Grenzwert in der Pseudozeit anzustreben.

Die *Approximation* der Erhaltungsgleichungen für kleine Machzahlen schränkt die Anwendungsbreite i.a. auf diesen Parameterbereich ein. Andererseits eröffnet sich Möglichkeit, effektive Algorithmen für inkompressible Stömungen auf diesen Aufgabenbereich zu übertragen. Erste grundlegende Untersuchungen in dieser Richtung erfolgten in Zusammenhang mit Verbrennungsvorgängen ([MS85], [ChP86]). Die Problemklasse der Strömungen mit exothermen chemischen Reaktionen, die häufig bei bei relativ niedrigen Geschwindigkeiten ablaufen, erweist sich als ein geeigneter Anwendungsfall für die Methodik der Approximation der kompressiblen Gleichungen.
In einer wachsenden Anzahl neuerer Veröffentlichungen ([Hori92], [TM93], [KGM94], [YJLW95], [LG96], [PHBCCFJ98], [B98]) findet die Aufgabenklasse der Strömungen mit niedriger Machzahl Eingang in numerische Algorithmen. Gemeinsam ist diesen Arbeiten die Modellannahme, daß die Wirkung von Schallwellen auf die interessierenden Vorgänge vernachlässigt werden kann.
Etwas schwerer fällt die Einordnung von Arbeiten von Zienkiewicz und Mitarbeitern ([ZC95], [CVZ98]), deren explizite und semiimplizite Algorithmen für den Einsatz sowohl im kompressiblen als auch im inkompressiblem Regime konzipiert sind, jedoch keine Aussagen über die Zuordnung zu bestimmten Bereichen der Machzahl enthalten.
In neueren Untersuchungen von Munz, Geratz, Roller und Klein ([GKMR96]) werden auch Effekte der Ausbreitung von Schallwellen für kleine Machzahlen in die Berechnungsverfahren einbezogen.

Die vorliegenden Untersuchungen und Ergebnisse basieren auf einer *Approximation* der Erhaltungsgleichung, wobei die Motivation besteht, vorhandene effiziente Algorithmen für die Simulation inkompressibler, instationärer Strömungen auf den Fall schwach kompressibler und von Strömungen mit niedriger Machzahl zu übertragen.

Die klassische Form der Modellierung schwach kompressibler Vorgänge ist durch die Boussinesq-Approximation gegeben. Hierbei wird einerseits die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes

$$\nabla \cdot \vec{v} \quad = 0 \tag{7}$$

angenommen. Der Einfluß der Dichtevariabilität wird im Rahmen dieser Approximation ausschließlich im Quellglied der Impulsgleichung (1) als äußere Kraft $\varrho(x,t)\vec{g}$ berücksichtigt. Für die Darstellung der (als klein angenommenen) Abweichung der Dichte von einem

Mittelwert ϱ_0 erfolgt zusätzlich noch eine Linearisierung des Dichteansatzes (5), so daß das Schwerkraftglied folgende Form annimmt:

$$\varrho\vec{g} = \varrho_0\vec{g} + (\varrho - \varrho_0)\vec{g} = -\varrho_0 \left[\beta_T(T - T_0) + \sum_{k=1}^{N} \beta_{y_k} y_k\right] \vec{g} \tag{8}$$

Die gewählte *lineare* Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur und von den Massenkonzentrationen y_k schränkt den Gültigkeitsbereich des Boussinesq-Ansatzes (8) zusätzlich ein. Da die Linearität des Ansatzes für die numerische Behandlung praktisch keine Vereinfachung bedeutet, wurde in eigenen numerischen Rechnungen eine direkt von (5) abgeleitete nichtlineare Darstellung der Dichte im Auftriebsglied verwendet ([GIMM94]).
Trotz der damit einhergehenden Präzisierung ist das Boussinesq-Modell nur bedingt für die Behandlung von Strömungen und Transportvorgängen mit stark veränderlicher Dichte geeignet. Kritisch sind insbesondere die unzureichende Approximation der Terme für den konvektiven Impuls-, Energie- und Stofftransport sowie in bestimmten Fällen die Unterdrückung des Expansionseffektes in der Energiegleichung zu werten.

Eine mögliche (und zunächst naheliegende) Modifikation des Modelles, die in Voruntersuchungen betrachtet wurde, beruht auf der Annahme einer vereinfachten Kontinuitätsbeziehung

$$\nabla \cdot (\varrho\vec{v}) \quad = 0. \tag{9}$$

Die Dichte ϱ ist hierbei in jedem Zeitschritt aus der Zustandsgleichung (5) neu zu berechnen und fließt in die Erhaltungsgleichungen als gegebene Funktion ein.
Die mit (9) beschriebene Approximation wird in der Literatur auch als "inelastisches Modell "([SWWAD93]) bezeichnet und kommt z.B. in der Meteorologie zur Anwendung.
In einer ersten Testphase wurde die inelastische Modellvariante in die bereits implementierten Algorithmen zur Simulation von Stömungs- und Transportvorgängen ([GMM94]) integriert. Hierzu war eine Verallgemeinerung des eingesetzten semiimpliziten Projektionsverfahrens und der stabilisierten Algorithmen zur Behandlung von skalaren Transportproblemen notwendig. Auf eine Darstellung der Details wird an dieser Stelle verzichtet, da letztlich ein Spezialfall der weiter unten beschriebenen Vorgehensweise vorliegt.
Das auf diesem Wege entstandene Verfahren erweist sich als numerisch stabil, und es besitzt weitgehend die Eigenschaften des inkompressiblen Modelles. Bei einer kritischen Analyse der numerischen Ergebnisse zeigen sich allerdings gravierende Schwächen des Ansatzes (9). Durch die erfolgte Vernachlässigung der Zeitableitung der Dichte erweist sich das Modell als völlig ungeeignet, Vorgänge mit erheblicher temporärer Dichteänderung [2] physikalisch richtig zu beschreiben. Dies äußert sich in paradoxem Verhalten des Geschwindigkeitsfeldes und, herrührend aus der Berechnung des Expansionsgliedes, erheblichen qualitativen

[2]Entsprechende physikalische Verhältnisse liegen bei anwendungsrelevanten Problemen sehr oft vor, z.B. beim Eintreten eines Strahles mit abweichender Dichte in ein Gebiet oder beim Voranschreiten eines steilen Temperaturgradienten.

Fehlern in der Energiebilanz.
Zur Erklärung dieser Erscheinungen sei insbesondere auf die in Kapitel (3) durchgeführten Untersuchungen zur Divergenz von Strömungsfeldern verwiesen. Dort wird gezeigt, daß unter bestimmten Voraussetzungen, die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes eine sehr gute Näherung auch bei veränderlicher Dichte darstellt, während (9) i.a. keine sinnvolle Approximation darstellen kann.
Die folgenden Überlegungen basieren auf der Verwendung der vollständigen Kontinuitätsgleichung (2). Um eine Abgrenzung der der Strömungen mit niedrigen Machzahlen vorzunehmen, erweist es sich als notwendig, die unterschiedliche Abhängigkeit des Druckes von thermodynamischen und von hydrodynamischen Einflüssen näher zu betrachten. Die entscheidenden Überlegungen hierzu stammen aus Untersuchungen von Verbrennungsvorgängen ([P82],[MS85],[ChP86]).

2.1 Modell mit Aufspaltung des Druckes

Als Ausgangspunkt dient eine Zerlegung des statischen Druckes $p(x,t)$ in einen thermodynamischen, nicht ortsabhängigen Anteil $p_T(t)$ und in einen hydrodynamischen (bzw. akustischen) Restanteil $p_d(x,t)$:

$$p(x,t) = p_T(t) + p_d(x,t) \tag{10}$$

Für Vorgänge mit kleiner Machzahl wird nun die grundlegende Annahme getroffen, daß der räumlich variierende Anteil des Druckes klein sei gegenüber dem thermodynamischen Druck:

$$p_T(t) \;\gg\; p_d(x,t) \tag{11}$$

Die Begründung dieser Abschätzung ist an einige wichtige physikalische Voraussetzungen geknüpft, die im folgenden kurz betrachtet werden sollen.

In einer Referenzkonfiguration $(p_r, \varrho_r, T_r, u_r)$ sei eine thermodynamische Zustandsgleichung

$$\varrho_r \qquad = \frac{p_r}{RT_r} \tag{12}$$

erfüllt. Für die relative Änderung der Dichte, ausgelöst durch räumliche Druckschwankungen Δp_d, ergibt sich aus (10) und (12)

$$\left(\frac{\Delta\varrho}{\varrho_r}\right)_{(\Delta p)} \quad = \frac{\Delta\varrho_{(\Delta p)}}{\varrho_r} \quad = \frac{\Delta p_d}{p_r}. \tag{13}$$

Die räumlichen Druckvariationen können nun, entsprechend ihrer physikalischen Ursachen, wie folgt abgeschätzt werden:
a) Variation des Druckes durch kinetische Anteile:

$$\Delta p_d \sim \varrho_r u_r^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta\varrho_{(\Delta p)}}{\varrho_r} = \frac{\Delta p_d}{p_r} \sim \frac{\varrho_r u_r^2}{p_r} = \frac{\varrho_r u_r^2}{\varrho_r RT_r} = \frac{u_r^2}{c_r^2} = M^2 \tag{14}$$

Hierbei steht $c_r = \sqrt{RT_r}$ für die örtliche Schallgeschwindigkeit.
b) Variation des Druckes durch temporäre Änderungen der Geschwindigkeit:

$$\Delta p_d \sim \frac{L\varrho_r u_r}{\tau} \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta\varrho_{(\Delta p)}}{\varrho_r} = \frac{\Delta p_d}{p_r} \sim \frac{L}{\tau c_r}M = \frac{L}{\tau u_r}M^2 \tag{15}$$

In (15) stellt τ die Zeiteinheit dar, in der wesentliche zeitliche Änderungen der Geschwindigkeit stattfinden, L steht für die Längeneinheit in der die charakteristischen Änderungen der Strömungsgrößen in räumlicher Dimension erfolgen. Die Abschätzung in (15) hängt offensichtlich davon ab, wie der physikalische Zeitmaßstab τ in Beziehung zu der Zeit L/c_r steht, die die Ausbreitung von Schallwellen im Gebiet Ω kennzeichnet.
In der Literatur wird überwiegend von der Annahme ausgegangen, daß

$$\tau \gg L/c_r \quad bzw. \quad \tau \sim L/u_r \tag{16}$$

gilt und damit die akustischen Wellen aus den Betrachtungen ausgeschlossen bleiben. Dies erscheint berechigt, wenn im physikalischen Vorgang keine Anregungen für Schwingungen mit höherer Frequenz erfolgt. [3]
c) Variation des Druckes infolge des Gravitationsfeldes:

$$\Delta p_d \sim \varrho_r g\Delta h \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta\varrho_{(\Delta p)}}{\varrho_r} = \frac{\Delta p_d}{p_r} \sim \frac{g\Delta h}{c_r^2} = \frac{g\Delta h}{u_r^2}M^2 \tag{17}$$

d) Druckänderungen, verursacht durch viskose Effekte:

$$\Delta p_d \sim \varrho_r u_r^2 \zeta \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta\varrho_{(\Delta p)}}{\varrho_r} = \frac{\Delta p_d}{p_r} \sim \zeta M^2 \tag{18}$$

Der in (18) eingeführte Reibungsbeiwert ζ ist im allgemeinen empirisch recht gut abschätzbar. Er ist an die Reynoldszahl gekoppelt und erreicht in vielen praktischen Strömungssituationen nur Werte von $\zeta \sim O(1)$. In bestimmten Fällen (sehr niedrige Reynoldszahl, spezielle geometrische Verhältnisse), kann jedoch auch $\zeta \gg 1$ auftreten.

Die Abschätzungen (14),(15),(17),(18) zeigen, daß unter bestimmten, oben genannten Voraussetzungen über den Strömungsvorgang, die örtlichen Schwankungen des dynamischen Druckes Δp_d die Größenordnung von M^2 besitzen:

$$\frac{\Delta p_d}{p_r} \sim M^2 \tag{19}$$

Da für Δp_d außerdem die Beziehung

$$\Delta p_d \sim p_d$$

[3] Diese Voraussetzung ist für bestimmte Vorgänge (z.B. solche mit schnellen chemischen Reaktionen) jedoch problematisch. In Arbeiten von Munz, Geratz, Klein und Roller (siehe z.B. [GKMR96]) wird daher auf diese Annahme verzichtet. Es wird neben p_d eine weitere Druckkomponente eingeführt, die separat aus einer Schwingungsgleichung berechnet wird und als Quellglied in der Impulsgleichung Einfluß auf die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes nimmt.

angenommen werden kann, folgt somit für kleine Machzahlen M die Gültigkeit von (11).
Aus (13) liest man ab, daß damit der Einfluß des dynamischen Druckes p_d auf die relative Dichtevariation klein bleibt.
Für die Änderung der Dichte, bedingt durch auftretende Temperaturdifferenzen ΔT, erhält andererseits man aus (12)

$$\left(\frac{\Delta\varrho}{\varrho_r}\right)_{\Delta T} = \frac{\Delta T}{T_r}. \tag{20}$$

Offensichtlich ist dieser Einfluß in der Zustandsgleichung (5) genau dann signifikant, wenn erhebliche Temperaturänderungen ΔT im Gebiet auftreten.
Eine weitere, ebenfalls nicht zu vernachlässigende Abhängigkeit der Dichte tritt bei inhomogenen Gemischen auf, wo Konzentrationsunterschiede zu einem von Zeit und Ort abhängigen Molekulargewicht $\bar{M}(x,t)$ führen.
Auf der Basis der vorangestellten Überlegungen zur Abschätzung des Druckes (11) wird in der thermischen Zustandsgleichung (5) und in der Energiegleichung auf den Druckanteil p_d verzichtet. In der Impulsgleichung erscheint andererseits *nur* der dynamische Druck p_d, da $\nabla p_T \equiv 0$ ist. Die damit erfolgte Entkopplung des dynamischen Druckanteiles von der Dichteberechnung bewirkt, daß die Ausbreitung von Schallwellen unterdrückt wird.
Im Ergebnis ergibt sich das folgende modifizierte Modell für ein Strömungsproblem mit gekoppeltem Wärmetransport:

$$\begin{aligned}\varrho\left\{\frac{\partial\vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,\vec{v}\right\} &= -\nabla p_d + \nabla\cdot\left\{\eta\left(\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^\top\right)\right\} \\ &\quad -\frac{2}{3}\nabla\cdot\{\eta\,(\nabla\cdot\vec{v})\,I\} + \varrho\vec{f}\,, \end{aligned} \tag{21}$$

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\vec{v}) = 0\,, \tag{22}$$

$$\varrho\left\{\frac{\partial e}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,e\right\} = -p_T\nabla\cdot\vec{v} + \nabla\cdot\{\lambda\,\nabla T\} + Q \tag{23}$$

wobei (6) für die innere Energie e gilt und die Dichte aus einer Zustandsgleichung

$$\varrho = \frac{\bar{M}p_T}{R^*T} \tag{24}$$

berechnet wird. Die Transportgleichungen für die Massenkonzentrationen von Gemischkomponenten (4) bleiben unverändert.
Die Berücksichtigung des thermodynamischen Druckes $p_T(t)$ (anstelle $p(x,t)$) in der thermischen Zustandsgleichung hat zur Folge, daß die Kontinuitätsgleichnung (22) im System zur Berechnung der Strömungsgrößen wie im inkompressiblen Falle als *Nebenbedingung* fungiert ([VTM99]).

2.2 Problem der Berechnung des thermodynamischen Druckes

Durch die Zerlegung des Druckes (10) erhält man mit $p_T(t)$ eine zusätzliche Funktion, die apriori nicht bekannt ist.
Ein wichtiger Spezialfall liegt vor, wenn das Lösungsgebiet Ω mit der freien Umgebung mit einem konstanten Ruhedruck p_0 in Verbindung steht. Aufgrund der oben getroffenen Annahmen kann dann von einem ebenfalls konstanten thermodynamischen Druck $p_T = p_0$ ausgegangen werden. Auch in geschlossenen Gebieten Ω bleibt p_T konstant, wenn der betrachtete Vorgang isotherm abläuft (siehe Abschnitt 3).
Bei den durchgeführten numerischen Rechnungen wurde vorerst ausschließlich der Spezialfall $p_T = p_0 = const.$ zugrunde gelegt.

Zur Bestimmung des zeitlichen Verlaufes der Größe $p_T(t)$ kann eine gewöhnliche Differentialgleichung abgeleitet werden. Dies geschieht mittels substantieller Ableitung der Zustandsgleichung und Umformungen unter Einbeziehung der Kontinuitätsgleichung sowie anschließender Integration über das Lösungsgebiet Ω. Man erhält für homogene Medien:

$$meas(\Omega)\frac{dp_T}{dt} + p_T \int\limits_{\Omega} \nabla \cdot \vec{v}\, dV = R \int\limits_{\Omega} \varrho \frac{DT}{Dt}\, dV \tag{25}$$

Weiter umgeformt mit Hilfe der Energiegleichung (23) ergibt sich

$$meas(\Omega)\frac{dp_T}{dt} + \gamma p_T \int\limits_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \vec{n}\, dS = (\gamma - 1)\left(\int\limits_{\partial\Omega} \lambda \nabla T \cdot \vec{n}\, dS + \int\limits_{\Omega} Q\, dV \right). \tag{26}$$

Obwohl die Herleitung von (26) auf der Voraussetzung eines konstanten Molekulargewichtes beruht, wird sie z.T. auch angewendet (siehe [TM93]), wenn Gemische vorliegen. In diesem Falle führt die substantielle Ableitung der Zustandsgleichung (24) mit anschließender Integration jedoch zunächst auf die Gleichung

$$meas(\Omega)\frac{dp_T}{dt} + p_T \int\limits_{\Omega} \left(\nabla \cdot \vec{v} + \frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt} \right) dV = \int\limits_{\Omega} R\varrho \frac{DT}{Dt}\, dV \quad . \tag{27}$$

Wie man an (27) erkennt, tritt ein zusätzlicher Term $\frac{1}{\bar{M}}\frac{D\bar{M}}{Dt}$ unter dem Integrationszeichen hinzu, der allerdings in der Praxis nur relativ kleine Werte annehmen dürfte (siehe auch Abschnitt 3.2). Das gleiche gilt für den durch den Diffusion bedingten Wärmetransport, der in die Berechnung der substantiellen Ableitung der Temperatur $\frac{DT}{Dt}$ eingeht.

Die in Abschnitt 4.1 diskutierte numerische Umsetzung des Modelles wirft die Frage nach der Erfüllung einer globalen Massenerhaltungsbeziehung[4] auf, die durch

$$\int\limits_{\Omega} \left[\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \vec{v}) \right] dV \quad = 0, \tag{28}$$

[4]siehe Bemerkung am Ende des Abschnittes

beschrieben werden kann. Aus (28) läßt sich durch Einsetzen der Zustandsgleichung ebenfalls eine Beziehung für $p_T(t)$ ableiten, die (27) sehr ähnlich ist:

$$\frac{dp_T}{dt} \int\limits_\Omega \frac{1}{RT}\, dV + p_T \int\limits_\Omega \frac{1}{RT} \left(\nabla \cdot \vec{v} + \frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt} \right) dV = \int\limits_\Omega \frac{\varrho}{T} \frac{DT}{Dt}\, dV \tag{29}$$

Der Vergleich von (29) und (27) zeigt die Tatsache, daß die gewöhnlich für $p_T(t)$ verwendete Bestimmungsgleichung (25) auch mit der Integralbeziehung

$$\int\limits_\Omega RT \left[\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \vec{v}) \right] dV \quad = 0. \tag{30}$$

identifiziert werden kann. Diese, in der Literatur bisher kaum beachtete, enge Beziehung zwischen der Gleichung (27) und der integralen Masseerhaltung (28) legt den Gedanken nahe, daß die Berechnung von $p_T(t)$ auch mittels (28) erfolgen kann.

Die Frage, welche Vorgehensweise aus physikalischer Sicht zu bevorzugen ist, bleibt allerdings offen. Wenig stichhaltig erscheint aus dieser Sicht die Argumentation von Li und Glowinski ([LG96]), die die globale Massenbilanz für ein ungeeignetes Kriterium zur Bestimmung des thermodynamischen Druckes halten, da sie bei Lösungsgebieten mit offenem Rand ($\Gamma_1^v \neq \partial\Omega$) nicht eingesetzt werden könne. Hierbei wurde offenbar auch übersehen, daß im Rahmen der verwendeten Modellierung für ein offenenes Gebiet die Annahme eines konstanten thermodynamischen Druckes gilt und die Bestimmung von p_T somit nicht erforderlich ist.

Bemerkung:
Wie im Abschnitt 4.1.2 gezeigt wird, existiert bei Aufgaben mit Geschwindigkeitsvorgabe auf dem gesamten Gebietsrand ($\Gamma_1^v = \partial\Omega$) eine numerischen Lösbarkeitsbedingung für die Druckprojektionsgleichung im diskreten Strömungsproblem. Im Falle des auf die direkte Erfüllung der Kontinuitätsgleichung aufbauenden Projektionsverfahrens (s. Abschnitt 4.1.1), handelt es sich bei dieser Lösbarkeitsbedingung um die integrale Massenbilanz.

Interessanterweise erhält man bei Einbeziehung einer mit Hilfe der thermodynamischen Zustandsgleichung und den skalaren Transportgleichungen) *umgeformten* Kontinuitätsgleichung (75) in den Projektionsschritt genau die oben diskutierte Gleichung (27) als Lösbarkeitsbedingung.

3 Zur Existenz von nahezu divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldern

Sowohl in Bezug auf die numerische Umsetzung als auch vom theoretischen Aspekt ist die Frage interessant, unter welchen Umständen auch im Falle einer veränderlichen Dichte nahezu divergenzfreie Geschwindigkeitsfelder auftreten können.

$$\nabla \cdot \vec{v} \quad \approx 0 \tag{31}$$

Für *homogene* Medien und kleine Machzahlen zeigt Panton [Pa84], daß eine Abschätzung

$$\nabla \cdot \vec{v} \sim -M^2 \frac{1}{\varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial t} \tag{32}$$

gilt, wobei jedoch von der zusätzlichen Annahme ausgegangen wurde, daß auftretende Temperaturunterschiede nur aus der dissipativen Erwärmung resultieren. Läßt man den Zufuhr von Wärmeenergie über den Gebietsrand bzw. die Evolution bereits im Gebiet vorhandener Temperaturunterschiede zu, so ist mit

$$\nabla \cdot \vec{v} \sim \left(\frac{1}{Pe} + M^2 \right) \frac{1}{\varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial t} \tag{33}$$

eine zusätzliche Abhängigkeit von der Pecletzahl zu berücksichtigen [5]. Wichtige Annahmen, die (33) zugrunde liegen, ist die stoffliche Homogenität, die Abwesendheit von Quellgliedern (außer der Dissipation) und eine ausgeglichene Volumenstrombilanz über die Ränder des Gebietes Ω. Darüberhinaus ist anzumerken, daß die Pecletzahl mit einem Längenmaßstab zu bilden ist, der den Skalen der wesentlichen Veränderungen von Größen entspricht.
Die obigen Abschätzungen sagen aus, daß unter bestimmten Voraussetzungen die Glieder der Kontinuitätsgleichung (2) sehr unterschiedliche Größenordnungen aufweisen können. Während die lokale Dichteänderung $\partial\varrho/\partial t$ und das konvektive Glied $\vec{v} \cdot \nabla\varrho$ (für $M \ll 1$ und $Pe \gg 1$) vergleichsweise große Werte aufweisen, die sich gegenseitig nahezu aufheben, erweist sich $\varrho\nabla \cdot \vec{v}$ demgegenüber als klein. Diese Beobachtung erklärt auch, daß das inelastische Modell (9) unter diesen Umständen eine schlechte Approximation darstellt.
Bei Vorhandensein starker innerer Wärmequellen, z.B. bedingt durch chemische Reaktionen, kann die Hypothese einer nahezu divergenzfreien Strömung im lokalen Bereich nicht aufrechterhalten werden.
Für nichthomogene Fluide, d.h. Gemische von Gasen oder Flssigkeiten, sind uns derartige Abschätzungen aus der Literatur nicht bekannt. Es erscheint daher naheliegend, die Frage nach der asymptotischen Erfüllung von (7) bei *isotherme* Strömungsvorgängen von Stoffgemischen zu stellen. Für die allgemeine Aufgabe themischer diffusiver Vorgänge kann eine additive Überlagerung der thermischen und diffusiven Effekte angenommen werden.

[5] Die Ableitung dieser Abschätzungen beruht auf einer geeigneten Entdimensionierung der auftetenden physikalischen Größen, siehe hierzu auch Abschnitt 3.3.

3.1 Betrachtung zur Energiebilanz von Stoffgemischen

Für eine genauere Untersuchung der aufgeworfenen Frage ist es erforderlich, in der Energiegleichung (3) die molekularen und diffusiven Anteile des Wärmestromvektors $\vec{q}$ zu quantifizieren. Vernachlssigt man dabei die meist sehr kleinen Anteile, die aus der Thermodiffusion resultieren (Dufoureffekte), so nimmt die Energiegleichung folgende Gestalt an ([W85]):

$$\varrho \left\{ \frac{\partial e}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\, e \right\} = -p \nabla \cdot \vec{v} + \nabla \cdot \{\lambda \nabla T - \varrho \sum_{k=1}^{N} h_k y_k \vec{V_k}\} + Q \tag{34}$$

In (34) tauchen individuelle Enthalpien der Gemischkomponenten auf, die durch

$$h_k = h_k^0 + \int_{T_0}^{T} c_{p,k} dT \approx h_k^0 + (T - T_0) c_{p,k} \qquad k = 1, \ldots, N \tag{35}$$

gegeben sind.
Aus (34) kann noch keine Aussage zum Verhalten von $\nabla \cdot \vec{v}$ bei konstanter Temperatur abgeleitet werden, da der diffusive Energietransport für $T = const.$ nicht verschwindet. Nach einigen Umformungen unter Verwendung von (35) und der Identitäten

$$e = \sum_{k=1}^{N} h_k y_k - p/\varrho \tag{36}$$

$$c_p = \sum_{k=1}^{N} c_{p_k} y_k \tag{37}$$

erhält sich jedoch:

$$\varrho c_p \left\{ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\, T \right\} = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \lambda \nabla T - \nabla T \cdot \varrho \sum_{k=1}^{N} c_{p_k} y_k \vec{V_k} + Q \tag{38}$$

Aus (38) wird deutlich, daß im isothermen Falle die Beziehung

$$\frac{Dp}{Dt} = 0 \tag{39}$$

erfüllt sein muß. Für Strömungen mit kleiner Machzahl bedeutet dies offensichtlich, daß der thermodynamische Druck p_T konstant bleibt. Aus der substantiellen Zeitableitung der thermischen Zustandsgleichung (5) ergibt sich andererseits

$$\frac{1}{\varrho} \frac{D\varrho}{Dt} = \frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt} + \frac{1}{p} \frac{Dp}{Dt} - \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt}. \tag{40}$$

Unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2) folgt aus (39) und (40) für isotherme Strömungsvorgänge in Stoffgemischen

$$\nabla \cdot \vec{v} = -\frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt}. \tag{41}$$

Die rechte Seite von (41) ist wegen

$$\frac{D\bar{M}}{Dt} = \frac{D}{Dt}\left[\left(\sum_{k=1}^{N}\frac{y_k}{M_k}\right)^{-1}\right] = -\sum_{k=1}^{N}\frac{\bar{M}^2}{M_k}\frac{Dy_k}{Dt} \tag{42}$$

durch die Verteilung der Konzentrationen y_k und über deren Evolutionsgleichungen letztlich durch die Diffusionsströme und ggf. durch chemische Reaktionen bestimmt.
Man erkennt, daß ein Zusammenhang besteht zwischen der Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitfeldes und der Modellierung des Diffusionsvorganges in Gemischen. Um diese Aussage genauer zu interpretieren, ist es erforderlich, auf die Problematik der Diffusion näher einzugehen.

3.2 Zur Modellierung der diffusiven Ströme

Die gebräuchliche kontinuumsmechanische Modellierung von Gemischen von Gasen oder Flüssigkeiten beruht auf Betrachtung einer *baryzentrischen* Geschwindigkeit $\vec{v}$ und einer *mittleren* Dichte ϱ. Die Wechselwirkung der einzelnen Fluidkomponenten untereinander wird durch den Diffusionsvorgang erfaßt. Als wichtiges Teilproblem muß dabei ein Modellabschluß hinsichtlich der i.a. unbekannten individuellen Geschwindigkeiten der Gemischkomponenten geschaffen werden. In der neueren Literatur finden sich zu dieser (nicht trivialen) Thematik nur relativ wenige Aussagen, meist gehen die verwendeten Ansätze auf ein grundlegendes Werk von Hirschfelder, Curtiss und Bird ([HCB54]) zurück.
Da die Modellierung der diffusiven Ströme im engem Zusammenhang mit der Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes und damit zu Eigenschaften des betrachteten numerischen Verfahrens steht, wenden wir uns dieser Problematik etwas ausführlicher zu.
Die Massenerhaltung für die N Komponenten eines Gemisches lautet

$$\varrho\left\{\frac{\partial y_k}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,y_k\right\} \quad = \quad -\nabla\cdot\{\vec{J}_k\} + q_k\,, \qquad\qquad k = 1,\ldots,N. \tag{43}$$

Für die in (43) erscheinenden (diffusiven) Ströme $\vec{J}_k$ gilt

$$\vec{J}_k = \varrho y_k \vec{V}_k,$$

wobei die Geschwindigkeiten $\vec{V}_k$ Relativgeschwindigkeiten der Stoffkomponenten zur baryzentrischen (massengemittelten) Geschwindigkeit $\vec{v} = \sum\limits_{i=1}^{N} y_i\vec{v}_i$ darstellen. Aus der Definition der Geschwindigkeiten $\vec{v}$ und $\vec{V}_k$ ergibt sich die für einen Diffusionsprozeß grundlegende Eigenschaft, daß die Summe der Ströme $\vec{J}_k$ verschwinden muß:

$$\sum_{k=1}^{N}\vec{J}_k = 0 \tag{44}$$

Die vorerst unbekannten Diffusionsgeschwindigkeiten $\vec{V}_k$ können mit Hilfe einer kinetischen Theorie (siehe z.B. [W85]) beschrieben werden, die auf der Impulsbilanz der Komponenten basiert, unterschiedliche Diffusionsvorgänge (molekulare Diffusion, Druckdiffusion, Thermodiffusion) berücksichtigt, viskose Effekte aber ausblendet. Das entstehende System nichtlinearer Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}\nabla X_i = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}}\right)(\vec{V}_j - \vec{V}_i) + (y_i - X_i)\left(\frac{\nabla p}{p}\right) + \left(\frac{\varrho}{p}\right)\sum_{j=1}^{N} y_i y_j (\vec{f}_i - \vec{f}_j) \\ + \sum_{j=1}^{N}\left[\left(\frac{X_i X_j}{\varrho D_{ij}}\right)\left(\frac{D_{T,j}}{y_j} - \frac{D_{T,i}}{y_i}\right)\right]\left(\frac{\nabla T}{T}\right), \\ i = 1, \ldots, N\end{aligned} \tag{45}$$

bildet zusammen mit (43) ein akzeptiertes mathematisches Modell zur Beschreibung der Gemischdynamik. In (45) stellen $D_{T,k}$ und D_{kl} thermische und binäre Diffusionskoeffizienten und die $X_k = y_k \frac{\bar{M}}{M_k}$ molare Massenkonzentrationen dar.
Wegen der ersichtlichen Komplexität des Systems (45) ist es allgemein üblich, vereinfachende Annahmen zu treffen, die es gestatten, abgeleitet von (45), die Ströme $\vec{J}_k$ explizit darzustellen. Als sinnvolle physikalische Vereinfachungen ist die Vernachlässigung der thermischen Diffusion (Soreteffekte), der Druckdiffusion und der auf äußere Kräfte zurückgehenden Einflüsse in Betracht zu ziehen. Man erhält die sog. Stefan-Maxwell-Gleichungen:

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}}\right)(\vec{V}_j - \vec{V}_i), \qquad i = 1, \ldots, N \tag{46}$$

Auch dieses nichtlineare System stellt jedoch für die Anwendung in Simulationsrechnungen noch ein erhebliches Problem dar, und es sind nur wenige Arbeiten bekannt, die auf Basis von (46) die numerische Bestimmung der diffusiven Ströme vornehmen (siehe etwa ([DDC96])).
Setzt man an dieser Stelle zusätzlich voraus, daß nur zwei Komponenten existieren ($N = 2$) *oder* daß die Diffusionskoeffizienten D_{ij} für alle Stoffpaarungen identisch sind ($D_{ij} = D, \quad \forall i, j = 1, ..., N$), vereinfacht sich (46) zu

$$y_k \vec{V}_k = -\, D\, \nabla y_k, \qquad k = 1, \ldots, N. \tag{47}$$

Die Beziehung (47) ist als Fick'sches Diffusionsgesetz bekannt, sie gilt im strengen Sinne jedoch nur unter den oben genannten Einschränkungen. Für Mehrkomponentensysteme stellt die Annahme einer einheitlichen Diffusivität D zweifellos eine starke Vereinfachung der physikalischen Verhältnisse dar und sollte nur angewendet werden, wenn der Diffusionsvorgang eine eher untergeordnete Rolle spielt.
In den Orginalarbeiten von Bird u.a. ([BSL60], [HCB54]) werden allgemeinere explizite Formeln für die diffusiven Ströme in Gemischen angegeben. Diese enthalten jedoch schwer erfaßbare Koeffizienten und finden daher auch kaum Eingang in mathematisch-numerische Modelle.

Als eine praktikable Näherung für die experimentell beobachtete Abhängigkeit der Diffusionskoeffizienten von der Gemischzusammensetzung wird häufig die Beziehung

$$D_k = \frac{1 - X_k}{\sum\limits_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{kj}}} \qquad k = 1, \ldots, N \tag{48}$$

verwendet. Dem entspricht ein Ansatz für die Diffusionsströme in Mehrkomponentensystemen in der Form

$$\vec{J}_k \;=\; \varrho y_k \vec{V}_k = -\varrho\, D_k\, \nabla y_k. \qquad k = 1, \ldots, N \tag{49}$$

Etwas abweichend von dieser Beziehung geben Warnatz und Maas ([WM93]) die diffusiven Ströme mit

$$\vec{J}_k \;=\; \varrho y_k \vec{V}_k = -\varrho\, D_{k,M}\, \frac{y_k}{X_k} \nabla X_k. \qquad k = 1, \ldots, N \tag{50}$$

vor und wählen für die individuellen Diffusivitäten $D_{k,M}$

$$D_{k,M} = \frac{1 - y_k}{\sum\limits_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{kj}}} \qquad k = 1, \ldots, N. \tag{51}$$

Beide Ansätze ((49) und (50)) weisen den erheblichen Mangel auf, daß die Summe der diffusiven Ströme (siehe (44)) nicht verschwindet. Diese Inkonsistenz wird in der Literatur jedoch i.a. ignoriert bzw. werden die daraus resultierenden Fehler in Kauf genommen. Wenig befriedigend erscheint in diesem Zusammenhang auch die häufig praktizierte Vorgehensweise, die Modellierung gemäß (48) oder (51) nur für $N-1$ Gemischkomponenten einzusetzen und den fehlenden Diffusionskoeffizienten D_N (bzw. $D_{N,M}$) aus der Beziehung (44) zu berechnen (siehe etwa [W85], S.637).
Insgesamt ist daher zu konstatieren, daß die gebräuchliche Modellierung der diffusiven Ströme mit erheblichen Unsicherheiten belastet ist. Für die oben diskutierte Herangehensweise werden die resultierenden Fehler mit ca. 10% ([WM93]) kalkuliert.
Bei einem numerischen Vergleich verschiedener Ansätze stellten Duffa und Koautoren ([DDC96]) Differenzen bei der Berechnung der Diffusionsströme in der Größenordnung von 10 - 20 % fest.
Falls keine chemischen Reaktionen auftreten ($q_k = 0, k = 1, \ldots N$), erhält man aus (41), (42) und (43) die Beziehung

$$\nabla \cdot \vec{v} = -\frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt} = -\frac{1}{\varrho} \sum_{k=1}^{N} \frac{\bar{M}}{M_k} \nabla \cdot \{\vec{J}_k\} \tag{52}$$

für die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes. Setzt man die verschiedenen Ansätze für die Ströme $\vec{J}_k$ in (52) ein und betrachtet vereinfachend ein 2 - Komponenten - System, so folgt aus (47) (und auch aus (49))

$$\nabla \cdot \vec{v} = \ldots = \frac{\bar{M}}{\varrho} \nabla \left(\varrho D_{12} \frac{M_2 - M_1}{M_1 M_2} \cdot \nabla y_1 \right) \tag{53}$$

und aus (50)

$$\nabla \cdot \vec{v} = ... = \frac{\bar{M}}{\varrho} \nabla \left(\varrho D_{12} \frac{M_2 - M_1}{\bar{M}^2} \cdot \nabla X_1 \right). \tag{54}$$

Offensichtlich verschwindet $\nabla \cdot \vec{v}$ in beiden betrachteten Fällen nicht, ausgenommen die Molekulargewichte beider Stoffe sind gleich. Wählt man hingegen den Ansatz (50) und setzt speziell konstante Diffusionskoeffizienten voraus ($D_{k,M} = D$), so erhält man aus (52)

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0.$$

Aus dem Dargelegten wird deutlich, daß bestehende Unsicherheiten bei der Modellierung der diffusiven Ströme sich direkt auf die Frage nach der Divergenzfreiheit einer Strömung von Stoffgemischen übertragen. Die Größe von $\nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\bar{M}} \frac{D\bar{M}}{Dt}$ wird dabei auch von der Differenz der Molekulargewichte der Gemischkomponenten beeinflußt.

3.3 Abschätzung von $\nabla \cdot \vec{v}$ durch Dimensionsanalyse

Wie im Abschnitt 3.2 gezeigt wurde, hängt bei Vermischungsvorgängen die Divergenz des baryzentrischen Geschwindigkeitsfeldes vom Diffusionsverhalten des Stoffgemisches ab. Ein Verschwinden der Göße $\nabla \cdot \vec{v}$ kann allgemein nicht abgeleitet werden. Numerische Rechnungen (siehe Kapitel 4) weisen jedoch darauf hin, daß, vor allem bei isothermer Strömung von Gemischen, *nahezu divergenzfreie* Strömungsfelder auftreten. Diese Beobachtung bedarf einer quantitativen Erklärung.
Um zu vergleichbaren Resultaten wie bei den homogenen Medien zu gelangen (vergl. (33)), gilt es zu untersuchen, in welchem Verhältnis das Glied $\nabla \cdot \vec{v}$ zu anderen Termen innerhalb der Kontinuitätsgleichung (22) steht. Hierzu soll in der Gleichung

$$\frac{1}{\varrho} \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\nabla \varrho}{\varrho} + \nabla \cdot \vec{v} \quad = 0 \tag{55}$$

eine Abschätzung der Größenordnung der Glieder erfolgen.
Zur Bewertung von $\nabla \cdot \vec{v}$ werde exemplarisch (53) herangezogen, wobei die Annahme besteht, daß diese Beziehung auch für Mehrkomponentensysteme prinzipiell richtig ist.
Vernachlässigt man den Einfluß der Quotienten der Molekulargewichte, d.h.

$$\bar{M} \frac{M_2 - M_1}{M_1 M_2} \sim 1,$$

so erhält man durch Entdimensionierung:

$$\nabla \cdot \vec{v} \quad \sim \quad \frac{1}{\varrho} \nabla \left(\varrho D_{12} \cdot \nabla c_1 \right) = \frac{1}{l_0} D \frac{1}{l_0} \left[\frac{1}{\varrho^*} \nabla^* (D_{12}^* \nabla^* c_1^*) \right] \tag{56}$$

$$\vec{v} \cdot \frac{\nabla \varrho}{\varrho} \quad = \quad \frac{V_0}{l_0} \left[\vec{v}^* \cdot \frac{\nabla^* \varrho^*}{\varrho^*} \right] \tag{57}$$

Die Größen V_0, l_0, D verkörpern repräsentative Werte für den Betrag der Geschwindigkeit, für die räumliche Ausdehnung und für die Diffusivität. Setzt man wie üblich voraus, daß die mit einem Stern versehenen dimensionslosen Größen einschließlich deren Ableitung nach der dimensionslosen Raumkoordinate die Größenordnung 1 besitzen, so folgt aus (56) und (57) die Abschätzung

$$\vec{v} \cdot \frac{\nabla \varrho}{\varrho} \quad \sim \quad \frac{V_0 l_0}{D} \nabla \cdot \vec{v} \quad = \quad ReSc\ \nabla \cdot \vec{v}. \tag{58}$$

Die in (58) erscheinende Schmidtzahl $Sc = \frac{\nu}{D}$ nimmt für Gase typischerweise Werte von $Sc = 0.2, ..., 3.0$ und für Flüssigkeiten Werte von $Sc = 10^2, ..., 10^3$ an. Im Falle turbulenter Strömungen gilt unter Verwendung von Wirbelviskositätsansätzen die Näherung $Sc \approx 1$. Entscheidend für die aus (58) zu ziehenden Schlußfolgerung ist somit die Größe der Reynoldszahl $Re = \frac{l_0 V_0}{\nu}$ (siehe auch die Bemerkung am Ende des Abschnittes).
Für moderate und große Zahlenwerte von Re, insbesondere für Flüssigkeiten, gilt offenbar die Abschätzung

$$\frac{1}{\varrho}\frac{\partial \varrho}{\partial t} \sim \vec{v} \cdot \frac{\nabla \varrho}{\varrho} \quad \gg \quad \nabla \cdot \vec{v}. \tag{59}$$

Aus (59) folgt, daß die Kontinuitätsgleichung in guter Näherung in die zwei separaten Beziehungen

$$\frac{D\varrho}{Dt} = \frac{\partial \varrho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \varrho = 0 \tag{60}$$

und

$$\nabla \cdot \vec{v} \quad = 0 \tag{61}$$

aufgespalten werden kann. Diese Überlegung zeigt, daß es bei Vorliegen der entsprechenden Voraussetzungen durchaus begründet ist, in den numerischen Rechnungen mit divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldern zu arbeiten. Der in (59) deutlich werdende Größenunterschied zwischen den Gliedern der Kontinuitätsgleichung hat auch Konsequenzen für die numerische Behandlung der vollständigen Kontinuitätsgleichung (siehe Abschnitt (4)).

Bemerkung: Einen kritischen Punkt bei der oben verwendeten Abschätzung bildet die Wahl des Längemaßstabes l_0, der die räumliche Distanz beschreiben sollte, in der sich die wesentlichen Variationen der betrachteten Größen (hier: Dichte, Konzentrationen, Geschwindigkeit) vollziehen. Bei der Ausbildung von *Grenzschichten* ist für l_0 die Dicke dieser Schicht anzusetzen. Innerhalb der betrachteten Aufgabenklasse kann es lokal und temporär durchaus zur Entstehung scharfer Grenzschichten kommen, was in diesen Bereichen die Gültigkeit der Abschätzung (59) entsprechend beeinträchtigen kann.

4 Verfahren zur numerischen Simulation dichteveränderlicher Vorgänge

Die Struktur des betrachteten Modelles für Strömungen mit kleinen Machzahlen ((21), 22), (23)) erlaubt, aus dem Bereich inkompressibler Strömungs- und Transportvorgänge bekannte numerischen Algorithmen in Grundzügen zu übertragen. Sowohl für die Approximation des Strömungsproblemes als auch für die Behandlung skalarer Transportgleichungen sind jedoch eine Reihe neuer, mit dem Erscheinen einer veränderlichen Dichtefunktion zusammenhängende Fragestellungen zu beachten.
Für die Berechnung instationärer inkompressibler Strömungsvorgänge stellen Projektionsverfahren (Druckiterationsverfahren) eine effektive und häufig genutzte Verfahrensklasse dar. Typischerweise wird hierbei in einem ersten Teilschritt eine den diskreten Impulsgleichungen genügende Näherung für die Geschwindigkeit ermittelt, die dann in einem Projektionsschritt in den Raum der diskret divergenzfreien Funktionen abgebildet wird.
Im Rahmen dieser grundsätzlichen Strategie können mehrere Realisierungsvarianten unterschieden werden, etwa hinsichtlich der Behandlung des nichtlinearen konvektiven Gliedes, bei der Wahl des Projektionsoperators oder bei der Festlegung der Raumpaarung für die FEM-Ansatzfunktionen (siehe z.B. [Tur96],[Tur97]).
Den vorliegenden Untersuchungen liegt ein semiimplizites Projektionsverfahren ([GC90]) zugrunde, das bereits im Zusammenhang mit der Berechnung gekoppelter Strömungs- und Transportvorgänge eingesetzt und untersucht wurde ([GMM94],[Mey98]).
Zur stabilisierten Diskretisierung von konvektiv-diffusiven Transportgleichungen findet das SUPG-Verfahren ([BH82]) sowie eine Variante des Stromliniendiffusionsverfahren nach C.Johnson ([Jo92]) Anwendung.
Die im weiteren häufig vorkommende Dichtefunktion wird durch einen repräsentativen Wert ϱ_0 entdimensioniert, und es gilt folgende Bezeichnungsweise:

$$\chi = \varrho/\varrho_0$$

Bei der Bildung von Integralen in der schwachen Formulierung erscheint diese Funktion vielfach als Gewichtsfunktion. Die resultierenden Matrizen und Vektoren erhalten daher den Index χ. Für die mit χ gewichtete Massenmatrix ergibt sich somit:

$$\mathbf{M}_\chi : \quad M_{\chi ij} = \int\limits_\Omega \chi \varphi_i \varphi_j \; dV$$

4.1 Modifikationen des Verfahrens zur Strömungsberechnung

Die Berücksichtigung der vollständigen Kontinuitätsgleichung (22) erfordert eine Anpassung des rechenzeitintensiven Projektionsschrittes und stellt einen erheblichen Eingriff in das Druckiterationsverfahren dar (siehe Abschnitt 4.1.1). Die Untersuchungen im Kapitel 3 haben gezeigt, daß für eine umfangreiche Klasse von Vorgängen mit veränderlicher Dichte mit guter Näherung die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes angenommen werden kann. Es erscheint sinnvoll, dieser Eigenschaft durch eine adäquate numerische Behandlung Rechnung zu tragen (siehe Abschnitt 4.1.3).

4.1.1 Verfahren mit Erfüllung der vollständigen Kontinuitätsgleichung

Ein semiimplizites Projektionsverfahren zur Lösung des inkompressiblen Strömungsproblems kann in Matrixschreibweise folgendermaßen formuliert werden ([GMM94]):

$$\begin{aligned} &\left[\bar{\mathbf{M}} + \Delta t\,\theta\,\nu_0\,\bar{\mathbf{A}} + \Delta t\,\bar{\mathbf{A}}_{BTD}\,(\underline{v}^n)\right]\,\tilde{\underline{v}}^{n+1} = \bar{\mathbf{M}}\underline{v}^n \\ &\quad + \Delta t\,\left[\theta\,\underline{\bar{F}}^{n+1} + (1-\theta)\left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\,\bar{\mathbf{A}}\,\underline{v}^n\right) - \bar{\mathbf{C}}(\underline{v}^n)\,\underline{v}^n - \bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{p}^n\right], \end{aligned} \tag{62}$$

$$\bar{\mathbf{B}}^\top\bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1} = \bar{\mathbf{B}}^\top\tilde{\underline{v}}^{n+1}, \tag{63}$$

$$\underline{v}^{n+1} = \tilde{\underline{v}}^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1}, \tag{64}$$

$$\underline{p}^{n+1} = \underline{p}^n + \frac{\gamma}{\Delta t}\,\underline{\varphi}^{n+1} \qquad \text{mit} \quad \gamma\,\epsilon\,\{1;2\}. \tag{65}$$

In (62) ... (64) symbolisieren überstrichene Größen jeweils Blockmatrizen (Anzahl der Diagonalblöcke = Raumdimension) oder -vektoren, $\bar{\mathbf{A}}$ verkörpert die viskose Matrix, $\bar{\mathbf{A}}_{BTD}$ einen Stabilisierungsterm, $\bar{\mathbf{C}}(\underline{v}^n)\,\underline{v}^n$ den konvektiven Anteil und $\bar{\mathbf{B}}$ bzw. $\bar{\mathbf{B}}^\top$ den diskreten Gradienten und die diskrete Divergenz.
Durch Einbeziehung einer variablen Dichte in die Impulsgleichung muß anstelle (62) eine Beziehung der Gestalt

$$\begin{aligned} &\left[\bar{\mathbf{M}}_\chi + \Delta t\,\theta\,\nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^\star + \Delta t\,\bar{\mathbf{A}}_{BTD\chi}\,(\underline{v}^n)\right]\,\tilde{\underline{v}}^{n+1} = \bar{\mathbf{M}}_\chi\underline{v}^n \\ &\quad + \Delta t\,\left[\theta\,\underline{\bar{F}}^{n+1} + (1-\theta)\left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^\star\,\underline{v}^n\right) - \bar{\mathbf{C}}_\chi(\underline{v}^n)\,\underline{v}^n - \bar{\mathbf{M}}_\chi\bar{\mathbf{M}}_{\chi L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{p}^n\right] \end{aligned} \tag{66}$$

betrachtet werden.
Hierbei wurde bei der speziellen Diskretisierung des Druckgliedes mit dem Vorfaktor $\bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{M}}_L$ ebenfalls eine Wichtung mit der Dichtefunktion χ vorgenommen, die auf eine entsprechende Wahl des Korrekturschrittes (s.u.) abzielt. Die Matrix $\bar{\mathbf{A}}^\star$ in (66) resultiert aus der Diskretisierung des vollständigen viskosen Gliedes in der Impulsgleichung (21). Die Berechnung dieser Blockmatrix verursacht speziell im räumlichen Falle eine erhebliche Erhöhung des Aufwandes im Assemblierungsschritt. Mit der Absicht, eine Blockdiagonalisierung dieser Matrix zu erreichen, wird mitunter ein transformierter dynamischer Druck

$$\tilde{p_d} = p_d - \frac{1}{3}\eta\,(\nabla\cdot\vec{v}) \tag{67}$$

eingeführt. Wie im inkompressiblen Falle führt dieses Vorgehen jedoch nur im Falle einer konstanten dynamischen Viskosität η zum Ziel.
Die Abbildung der Zwischengeschwindigkeit $\tilde{\underline{v}}^{n+1}$ erfolgt nicht wie bisher in den Raum der diskret divergenzfreien Funktionen, sondern in eine Mannigfaltigkeit, die durch eine

Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung (2) beschrieben werden kann.
Anstelle von (63), (64) erscheinen die folgenden Beziehungen:

$$\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{I}}_\chi \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1} \bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}^{n+1} \;=\; \bar{\mathbf{B}}^\top (\bar{\mathbf{I}}_\chi \underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}} \underline{\chi}_t, \tag{68}$$

$$\underline{v}^{n+1} \;=\; \underline{\tilde{v}}^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1} \bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}^{n+1}\,, \tag{69}$$

Die Aufdatierung des Druckes erfolgt weiterhin gemäß (65).
$\underline{\chi}$ bezeichnet hierbei die Diskretisierung der Funktion χ im FEM-Raum der Geschwindigkeit und $\underline{\chi}_t$ ist eine Approximation der Zeitableitung dieser Größe.
In (68) erscheint mit $\bar{\mathbf{I}}_\chi$ eine Diagonalmatrix, die die Diagonalelemente $\bar{\mathbf{I}}_{\chi ii} = \underline{\chi}_i$ besitzt. Diese Matrix kann als Approximation für das Produkt $\bar{\mathbf{M}}^{-1} \bar{\mathbf{M}}_\chi$, das aus einer FEM-Approximation von $\chi \vec{v}$ resultieren würde,

$$\vec{Z} = \chi \vec{v} \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\mathbf{M}} \underline{Z} = \bar{\mathbf{M}}_\chi \underline{v} \tag{70}$$

interpretiert werden, andererseits entspricht $\bar{\mathbf{I}}_\chi$ dem diskreten Operator, der bei Anwendung einer Kollokationsmethode auf $\vec{Z} = \chi \vec{v}$ entsteht.
Die Matrix $\hat{\mathbf{M}}$ in (68) verkörpert eine "gemischte Massenmatrix", gebildet aus den FEM-Ansatzfunktionen des Druckes und der Geschwindigkeit.
An dieser Stelle sei vermerkt, daß das durch (68, 69) beschriebene Verfahren durchaus nicht die einzige Möglichkeit der Projektion der Zwischengeschwindigkeit $\underline{\tilde{v}}^{n+1}$ darstellt.
Folgende Kriterien für die konkrete Wahl der Abbildung wurden verwendet:

1. $\underline{v}^{n+1}$ erfülle eine diskretisierte Form der Kontinuitätsgleichung
2. Die Impulsanteile, die durch die Druckkorrektur und im lokalen Beschleunigungsglied durch die Geschwindigkeitskorrektur entstehen, heben sich, wie im inkompressiblen Falle, auf. (bei Annahme von $\gamma = 1$)
3. Zur Realisierung des Projektionschrittes (siehe (68)) soll mit einer möglichst einfach aufgebauten und symmetrischen Matrix gearbeitet werden.

Der oben gewählte Ansatz (68, 69, 65) erfüllt alle drei Kriterien.
Eine erwähnenswerte Alternative stellt die folgende Vorgehensweise dar:
Die Kontinuitätsgleichung werde in der ausdifferenzierten Form

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \varrho \nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \varrho \quad = 0 \tag{71}$$

diskretisiert, es ergibt sich in Matrixschreibweise:

$$(\bar{\mathbf{B}}_\chi^\top + \hat{\mathbf{M}}_{(\nabla\chi)}) \underline{v}^{n+1} + \hat{\mathbf{M}} \underline{\chi}_t = 0 \tag{72}$$

Die neu eingeführte Matrix $\hat{\mathbf{M}}_{(\nabla\chi)}$ bezeichnet eine (gemischte) Massenmatrix, deren Blöcke mit den Komponenten der Vektorfunktion $\nabla\chi$ gewichtet sind. Ein Projektionsverfahren, das wenigstens den ersten beiden der genannten Kriterien genügt, ist durch

$$(\bar{\mathbf{B}}_\chi^\top + \hat{\mathbf{M}}_{(\nabla\chi)})\, \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\, \bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}^{n+1} \;=\; (\bar{\mathbf{B}}_\chi^\top + \hat{\mathbf{M}}_{(\nabla\chi)})\, \underline{\tilde{v}}^{n+1} - \hat{\mathbf{M}} \underline{\chi}_t \tag{73}$$

nebst Hinzunahme der Gleichungen (65, 69) gegeben.
Offensichtlich erhält man mit (73) eine recht unhandliches unsymmetrisches System zur Bestimmung von $\underline{\varphi}^{n+1}$. Wird anstelle von (71) die Kontinuitätsgleichung in der Form (55) diskretisiert, so ergibt sich eine Abbildung

$$(\bar{\mathbf{B}}^\top + \hat{\mathbf{M}}_{(\nabla Y)})\,\bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\,\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1} \quad = \quad (\bar{\mathbf{B}}^\top + \hat{\mathbf{M}}_{(\nabla Y)})\,\underline{\tilde{v}}^{n+1} - \hat{\mathbf{M}}\underline{Z}_t \tag{74}$$

Hierbei wurde die Abkürzung $Y = ln\chi$ benutzt.
Die Systemmatrix in (74) besitzt, im Gegensatz zum Operator in (73), einen symmetrischen, positiv definiten Anteil, der bei der iterativen Lösung des Gleichungssystemes hilfreich sein kann.
Die aus den vorliegenden numerischen Rechnungen unter Verwendung der Nebenbedingung (68) gewonnenen Erfahrungen weisen auf gewisse Instabilitäten hin, die von der direkten Einbeziehung der approximierten Zeitableitung der Dichte ($\hat{\mathbf{M}}\underline{\chi}_t$, siehe (68)) in den Projektionsschritt herrühren (siehe Abschnitt 5). Bei der Einschätzung dieser Problematik wurde zunächst davon ausgegangen, daß einfache Umformungen der Kontinuitätsgleichung, wie sie auch in der Literatur auftauchen (siehe z.B. ([LG96])), keinen grundsätzlichen Einfluß auf das Stabilitätsverhalten des Algorithmus haben.
Eine andere Situation liegt jedoch offenbar vor, wenn die substantielle Zeitableitung der Dichte unter Einbeziehung von (40) *vollständig* durch Operatoren ersetzt wird, die nur Ortsableitungen der physikalischen Größen enthalten. Eine Untersuchung der sich hieraus ergebenden, qualitativen Unterschiede im Verhalten des Projektionsverfahrens, wurde erstmals in einer Arbeit von van't Hof u.a. ([VTM99]) veröffentlicht.
Nach einigen Umformungen und unter Verwendung der Zustandsgleichungen für ideale Gase erhält man die folgende Beziehung für die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\gamma - 1}{\gamma p}\,(Q - \nabla \cdot \vec{q}) - \frac{1}{\gamma p}\frac{Dp}{Dt} + \sum_{k=1}^{N} \frac{\bar{M}}{M_k}\left(q_k - \nabla \cdot \vec{J}_k\right) \tag{75}$$

Es wird deutlich, daß gerade die grundlegende Annahme (11) der Approximation für kleine Machzahlen sicherstellt, daß die verbleibende Zeitableitung des Druckes weiter umgeformt werden kann (76).

$$\frac{Dp}{Dt} \approx \frac{Dp_T}{Dt} = \frac{dp_T}{dt} \tag{76}$$

Wie im Abschnitt 2.2 erwähnt, ist $p_T(t)$ unter bestimmten Bedingungen sogar konstant. Bei zeitlich veränderlichem thermodynamischen Druck $p_T(t)$ kann die Ableitung $\frac{dp_T}{dt}$ mit Hilfe der Gleichung (27) berechnet werden. Es bleibt allerdings zu überprüfen, welche numerischen Eigenschaften ein auf (75) beruhendes Projektionsverfahren, insbesondere bei veränderlichem Druck $p_T(t)$, aufweist.
Eigene Untersuchungen zu dieser Strategie im Projektionsschritt wurden bisher nicht angestellt. In Bezug auf die Details der numerischen Realisierung ergeben sich jedoch weitgehende Parallelen mit den in dieser Arbeit behandelten Algorithmen.

Die nachfolgenden Ausführungen beschränken sich auf das zuerst beschriebene Projektionsverfahren (68, 69, 65).
Zur Vereinfachung des numerischen Modelles wird vorerst mit einer mittleren konstanten Dichte im Zeitschritt gearbeitet, die zusammen mit der Zeitableitung der Dichte iterativ bestimmt wird. Der Lösungsalgorithmus in Bezug auf die Behandlung des Dichteproblemes kann folgendermaßen beschrieben werden:

Start:

$$\begin{aligned}
\chi_0^{(0)} &= \chi(T_0, y_{k_0}, p_T) \qquad \text{aus Anfangswerten} \\
\left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_1^{(0)} &= 0 \\
\bar{\chi}_1^{(0)} &= \chi_0^{(0)}
\end{aligned}$$

Zeitschritt $[t_n, t_{n+1}]$:

Iteration: Für $i := 1, ..., s_n$

löse Strömungsproblem mit $\bar{\chi}_n^{(i-1)}, \left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_n^{(i-1)}$

löse Transportprobleme mit $\bar{\chi}_n^{(i-1)}$

$$\begin{aligned}
\chi_{n+1}^{(i)} &= \chi(T_{n+1}^{(i)}, y_{k_{n+1}}^{(i)}, p_T) \\
\bar{\chi}_n^{(i)} &= (1-\alpha)\chi_n + \alpha\chi_{n+1}^{(i)} \\
\left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_n^{(i)} &= \frac{1}{\Delta t}(\chi_{n+1}^{(i)} - \chi_n)
\end{aligned}$$

Startwerte für neuen Zeitschritt:

$$\begin{aligned}
\chi_{n+1} &= \chi_{n+1}^{(s_n)} \\
\left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_{n+1}^{(0)} &= \left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_n^{(s_n)} \\
\bar{\chi}_{n+1}^{(0)} &= \chi_{n+1} + \beta \Delta t \left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)_n^{(s_n)}
\end{aligned}$$

In dem Schema zeigen hochgestellte Indizees die Iterationsnummer an und tiefgestellte Indizierungen kennzeichnen den aktuellen Zeitschritt. Für die Parameter α, β wurde meist $\alpha = \beta = 0.5$ gewählt. In einigen Fällen führt die Extrapolation der Dichte zu negativen Werten von $\bar{\chi}_{n+1}^{(0)}$, so daß dann auf $\beta = 0$ umzuschalten ist.
Die Konvergenz des beschriebenen iterativen Prozesses ist allerdings nicht allgemein gesichert, sondern hängt u.a. von der Größe des Zeitschrittes und von der Dynamik temporärer Dichteänderungen im Lösungsgebiet ab. Eine in diesem Sinne kritische Situation liegt z.B. beim Start einer Simulation aus einem Ungleichgewichtszustand vor (siehe auch die Diskussion der Testbeispiele im Kapitel 5).
Das in manchen Fällen unbefriedigende Konvergenzverhalten des Algorithmus gibt Anlaß über eine besser angepaßte Behandlung der Nichtlinearitäten und Kopplungen nachzudenken. Die genannten Konvergenzprobleme können nur bedingt durch die Wahl kleinerer Zeitschritte gelöst werden. Eine nähere Betrachtung des modifizierten Projektionsverfahrens zeigt nämlich eine inhärente Instabilität, die sich so äußert, daß die für die Hilfsgröße $\underline{\varphi}^{n+1}$ berechneten Werte nicht mit Δt klein werden. Hieraus resultieren insbesondere Störungen des berechneten Druckfeldes. Dieses Verhalten stellt gegenüber den Projektionsverfahren für inkompressible Vorgänge ((62),..., (65)) eine neuartige Problematik dar. Ursächlich hierfür ist die Tatsache, daß die verwendete Approximation der Dichteableitung $\underline{\chi}_t = \frac{1}{\Delta t}(\chi_{n+1}^{(i)} - \chi_n)$ bezüglich der Zeit nicht stetig ist. Die rechte Seite der Projektionsgleichung (68) und folglich auch die Lösung $\underline{\varphi}^{n+1}$ besitzen somit nicht die Ordnung von Δt.
Der beschriebene numerische Effekt gewinnt allerdings erst bei relativ kleinen Werten von Δt merklich an Einfluß auf den Berechnungsprozeß. Für die in den numerischen Beispielen gewählten Zeitschrittweiten ($\Delta t \sim 10^{-3}$) traten keine Probleme bei der Ermittlung des Druckfeldes zu Tage.

4.1.2 Numerische Lösungsbedingungen für den Projektionsschritt

Für den Fall, daß Dirichletrandbedingungen für die Geschwindigkeit auf dem gesamten Rand $\partial\Omega$ vorgeschrieben sind,

$$\partial\Omega = \Gamma_1^{(v)} \tag{77}$$

ist, wie im Inkompressiblen, eine Orthogonalitätsbedingung bei der Lösung von (68) zu beachten. Der Nullraum von $\bar{\mathbf{B}}$ enthält nämlich das Element $\underline{e} = (1, 1, ..., 1)^\top$ [6], daher muß die rechte Seite von (68) orthogonal zu diesem Vektor stehen:

$$\underline{e} \quad \perp \quad \bar{\mathbf{B}}^\top(\bar{\mathbf{I}}_\chi \underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}}\underline{\chi}_t \tag{78}$$

Führt man die Matrizen und Vektoren in (78) auf ihre Definition im Rahmen der FEM - Diskretisierung zurück, so ergibt sich:

$$\int_{\partial\Omega} \sum_j \chi_j \underline{\tilde{v}}_j^{n+1} \phi_j \cdot \underline{n} d\Gamma + \frac{1}{\Delta t} \left[\int_\Omega \sum_j \hat{\chi}_j \phi_j dV - \int_\Omega \sum_j \check{\chi}_j \phi_j dV \right] = 0 \tag{79}$$

[6] $\underline{e}$ sei das zum FEM-Raum des Druckes gehörige Einselement und $\hat{\underline{e}}$ das zum FEM-Raum der Geschwindigkeit zugehörige Element.

Hierbei wurde beachtet, daß für die Testfunktionen aus dem FEM - Raum des Druckes $\sum_i \psi_i \equiv 1$ gilt und stetige Ansatzfunktionen ϕ_j verwendet wurden. Die in (79) erscheinende Geschwindigkeit ist wegen (77) als Randwert vorgegeben und die Beziehung (79) verkörpert somit eine Bedingung für die Berechnung der dimensionslosen Dichte $\underline{\chi}$. Physikalisch läßt sich (79) als Bilanz von ein- bzw. ausströmender Masse und zeitlicher Masseänderung im Gebiet interpretieren bzw. auch als Diskretisierung der Integralbeziehung (28).
Die Notwendigkeit der Erfüllung der Orthogonalitätsbeziehung (78) wirft grundsätzliche Fragen zur gesamten Lösungsstrategie auf.
Die *exakte* Erfüllung von (78) ist nämlich nicht a priori gegeben, sondern hängt von folgenden Einflußfaktoren ab:

1. In Gebieten mit Vorgabe der Geschwindigkeit auf dem gesamten Rand (77) wird $p_T(t)$ i.a. nicht konstant sein. Die Berechnung des thermodynamischen Druckes auf der neuen Zeitschicht beeinflußt unmittelbar die Erfüllung von (79). Wird $p_T(t_{n+1})$ mit Hilfe einer Beziehung der Form (30) bestimmt, ist (79) i.a. nicht erfüllt.

2. Wie in Abschnitt 3.2 gezeigt wird, sind in Zusammenhang mit der Modellierung von diffusiven Strömen gewisse Störungen der integralen Massebilanz möglich. Dies bedeutet, daß selbst bei isothermen Vorgängen systematische Abweichungen von (79) auftreten können.

3. Generell führen auch numerische Fehler, die bei der Berechnung der Temperatur und von Konzentrationen auftreten, über die Dichteberechnung (24) zu Störungen der Bilanzgleichung (79).

4. Die Berechnung der Dichte und deren Ableitung im Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ stellt einen iterativen Prozeß dar. Die Startwerte für diese Iteration erfüllen nicht automatisch die Massenbilanzgleichung.

Zur Sicherstellung der Orthogonalitätsbedingung (78) kommen zwei prinzipiell recht unterschiedliche Verfahrensweisen in Betracht, die im Folgenden kurz analysiert werden:
Zum einen kann (78) durch entsprechende Wahl von $p_T(t_{n+1})$ erfüllt werden. Dies bedeutet, daß die Bestimmung des thermodynamischen Druckes an diese Massenbilanz geknüpft wird, und damit andere Alternativen (siehe Abschnitt 2) ausscheiden. Problematisch erscheint allerdings, daß in die Berechnung des Druckes $p_T(t)$ (und der Dichte) damit auch Einflüsse eingehen, die nicht physikalischer Natur sind, wie etwa Approximationsfehler.
In der numerischen Umsetzung wurde vorerst nur der Fall eines geschlossenen Lösungsgebietes ($\underline{v}|_{\Gamma_1} = 0$) betrachtet. Die Berechnung des thermodynamischen Druckes auf der oberen Zeitschicht $p_T(t_{n+1})$ erfolgt dann aus der Bedingung

$$\int_\Omega \sum_j \chi_j(t_n)\phi_j dV = \int_\Omega \sum_j \chi_j(t_{n+1})\phi_j dV. \tag{80}$$

Eine weitere Möglichkeit, die Lösbarkeit des Systems (68) sicherzustellen, besteht offenbar darin, die rechte Seite von (68) nur temporär in den zum Vektor $\vec{e}$ orthogonalen Raum abzubilden. Diese Vorgehensweise kann nur bei relativ kleinen Korrekturen eingesetzt werden,

da sonst, wie auch numerische Rechnungen zeigen, ein unphysikalisches Lösungsverhalten auftritt.
Die konkrete Realisierung der Projektion des Vektors $\underline{r} = \bar{\mathbf{B}}^{\top}(\bar{\mathbf{I}}_{\chi}\underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}}\underline{\chi_t}$ in den zu $\underline{e}$ orthogonalen Unterraum kann zum einen als orthogonale Projektion

$$P_1\,\underline{r} := \underline{r} - \epsilon_1\,\underline{e} \quad mit \quad \epsilon_1 = \frac{\underline{e}^T\,\underline{r}}{\underline{e}^T\,\underline{e}} \tag{81}$$

erfolgen und, indem eine virtuelle Verschiebung der Dichteableitung vorgenommen wird, auch durch die Abbildung

$$P_2\,\underline{r} := \underline{r} - \hat{\mathbf{M}}\,\epsilon_2\,\underline{\hat{e}} \quad mit \quad \epsilon_2 = \frac{\underline{e}^T\,\underline{r}}{\underline{e}^T\,\hat{\mathbf{M}}\underline{\hat{e}}} = \frac{\underline{e}^T(\bar{\mathbf{B}}^{\top}(\bar{\mathbf{I}}_{\chi}\underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}}\underline{\chi_t})}{|\Omega|}. \tag{82}$$

Aus praktischer Sicht scheint die Methode (82) gegenüber (81) den Vorzug zu verdienen, da die Größe des Trägers und die Zugehörigkeit zum Gebietsrand wichtend in den Vektor $\hat{\mathbf{M}}\,\hat{\epsilon}\,\underline{\hat{e}}$ eingeht. In jedem Falle handelt es sich jedoch um ein formales mathematisches Verfahren, das keine fundierte physikalische Interpretation besitzt.
Für ein Projektionsverfahren, das auf der Beziehung (75) aufbaut, ergeben sich prizipiell gleiche Probleme. Im Falle eines veränderlichen thermodynamischen Druckes $p_T(t)$ ist die Lösbarkeitsbedingung jedoch mit der Bestimmungsgleichung (27) identisch.

4.1.3 Verfahren mit divergenzfreien Geschwindigkeitsfeldern

Unter Beachtung der modifizierten Impulsbilanz für veränderliche Dichte (66)

$$\begin{aligned}\left[\bar{\mathbf{M}}_{\chi} + \Delta t\,\theta\,\nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^{\star} + \Delta t\,\bar{\mathbf{A}}_{BTD\chi}\,(\underline{v}^n)\right]\,\underline{\tilde{v}}^{n+1} &= \bar{\mathbf{M}}_{\chi}\underline{v}^n \\ +\Delta t\,\left[\theta\,\underline{\bar{F}}^{n+1} + (1-\theta)\left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^{\star}\,\underline{v}^n\right) - \bar{\mathbf{C}}_{\chi}(\underline{v}^n)\,\underline{v}^n - \bar{\mathbf{M}}_{\chi}\bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{p}^n\right]\end{aligned}$$

kann ein Projektionsverfahren zur Erzeugung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder $\underline{v}^{n+1}$ folgende Form aufgeschrieben werden:

$$\bar{\mathbf{B}}^{\top}\bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1} = \bar{\mathbf{B}}^{\top}(\underline{\tilde{v}}^{n+1}) \tag{83}$$

$$\underline{v}^{n+1} = \underline{\tilde{v}}^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1}\,, \tag{84}$$

Die Aufdatierung des Druckes erfolgt hier wiederum gemäß (65).
Das so beschriebene Verfahren besitzt deutliche Analogien zu dem ursprünglichen Algorithmus für inkompressible Medien ((62) ... (64), [GC90]). Die Systemmatrix des Projektionsschrittes (83) enthält jedoch eine Skalierung, die unmittelbar von der Dichteverteilung bestimmt wird. Dieser Einfluß macht sich bei der iterativen Lösung des Gleichungssystems negativ bemerkbar:

Die Vorkonditionierung der Systemmatrix in (83) erfolgt mit Hilfe eines hierarchischen Algorithmus, der die exakte Lösung eines Grobgittersystems beinhaltet. Ein Grobgitteroperator wird im Simulationsprozeß einmalig assembliert und faktorisiert und widerspiegelt daher natürlich nicht die in $\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1} \bar{\mathbf{B}}$ gegebene Abhängigkeit von der Dichteverteilung. Die Erfahrung mit Testbeispielen zeigt, daß die hierarchische Vorkonditionierung bei starken Dichtevariationen beeinträchtigt wird, was sich in einer Erhöhung der Iterationszahl im CG-Verfahren niederschlägt.
Die konkrete Wahl des Projektionsoperators ist hier durch die Forderung bestimmt, daß die aus der Druckkorrektur (65) resultierende Störung der Impulsbilanz exakt durch die Geschwindigkeitskorrektur im instationären Glied aufgehoben wird. Durch eine Abschwächung dieser Bedingung ergeben sich weitere Varianten des Verfahrens, die jedoch nicht untersucht wurden.
Eine spezielle Orthogonalisierung der rechten Seite des Projektionssystems, wie im Falle der vollständigen Kontinuitätsgleichung (siehe Abschnitt (4.1.2)), ist nicht erforderlich, da für $\partial\Omega = \Gamma_1^{(v)}$ die Bedingung

$$\underline{\varrho} \quad \perp \quad \bar{\mathbf{B}}^\top (\underline{\tilde{v}}^{n+1})$$

automatisch erfüllt ist.

4.2 Zur numerischen Behandlung von Transportgleichungen bei veränderlicher Dichte

Die Dichte als veränderliche Funktion beeinflußt in erheblichem Maße auch die numerischen Eigenschaften von skalaren Transportgleichungen für gewisse Größen Φ_k

$$\frac{\partial(\varrho\Phi_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho\Phi_k\vec{v}) \quad = \quad \nabla \cdot \{\kappa_k \nabla\Phi_k\} + \varrho\, q_k\,, \quad k = 1, \ldots, K, \tag{85}$$

die das Strömungsproblem flankieren. Üblicherweise wird der Transportterm auf der linken Seite von (85) mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung (22) umgeformt, und man erhält die etwas gebräuchlichere Form der Bilanzgleichungen:

$$\varrho \left\{ \frac{\partial\Phi_k}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\, \Phi_k \right\} \quad = \quad \nabla \cdot \{\kappa_k \nabla\Phi_k\} + \varrho\, q_k\,, \quad k = 1, \ldots, K. \tag{86}$$

Während die zu (86) führende Umformung aus physikalischer Sicht kein Problem darstellt, ist sie durchaus von Bedeutung für die numerische Behandlung der Transportgleichungen. Es kann der (unerwünschte) Effekt auftreten, daß numerische Fehler bei der Approximation der Kontiuitätsgleichung merklich die Erhaltungseigenschaften der Transportgleichungen beeinträchtigen. In einigen Arbeiten wird daher die ursprüngliche ("konservative ") Gleichung (85) oder Mischformen zwischen beiden betrachtet, jedoch ist die Mehrzahl der

entwickelten numerischen Verfahren für konvektiv-diffusive Transportgleichungen auf die Form (86) ausgerichtet.
Die vorliegenden Untersuchungen basieren ebenfalls auf (86), wobei die Verwendung bekannter Verfahren zur Stabilisierung der FEM hierfür ausschlaggebend war. Für die Strategie des nichtlinearen Iterationsverfahrens im Zeitschritt erscheint es aus dieser Sicht allerdings vorteilhaft, den Projektionsschritt jeweils *vor* der Neuberechnung von Transportgrößen auszuführen.
Als Ausgangspunkt für die FEM dient eine Semidiskretisierung der instationären Gleichungen (86) in der Zeitrichtung mittels eines θ-Verfahrens. Für die Ortsdiskretisierung der Transportgleichungen kommen Stabilisierungstechniken nach Hughes und Johnson ([BH82], [Jo92]) zur Anwendung (im weiteren durch SUPG/SD abgekürzt). Kennzeichnend für diese Verfahren ist Verwendung spezieller Testfunktionen der Form

$$w = \varphi + \tau(v, h, Pe_h)\, \vec{v} \cdot \nabla\varphi, \tag{87}$$

wobei φ eine gewöhnliche (meist lineare oder multilineare) FEM-Ansatzfunktion und $\tau(.)$ einen geeignet zu wählenden upwind-Parameter darstellt. Weiterhin ist zu beachten, daß die hier verwendeten Stabilisierungstechniken für konvektiv-diffusive Gleichungen der Form

$$\alpha\Phi + (\vec{v} \cdot \nabla)\,\Phi \quad = \quad \nabla \cdot \{\kappa\, \nabla\Phi\} + q \tag{88}$$

konzipiert sind.
Für den Fall konstanter Dichte erhält man für die gesuchte Größe $\underline{\Phi}_k^{n+1}$ auf der oberen Zeitschicht folgende diskrete Gleichung (siehe [GMM94]):

$$\begin{aligned}
&\{\, \mathbf{M} + \mathbf{M}_{k,\tau} + \Delta t\, \theta\, [\kappa_{k,0}\, \mathbf{A}_k(\hat{\varepsilon}_k) + \mathbf{C}\,(\underline{v}^n) + \mathbf{C}_{k,\tau}(\underline{v}^n)]\,\}\ \underline{\Phi}_k^{n+1} \ = \\
&\quad (\, \mathbf{M} + \mathbf{M}_{k,\tau}\,)\ \underline{\Phi}_k^n + \Delta t\, \theta\, \left(\underline{F}_k^{n+1} + \underline{F}_{k,\tau}^{n+1}\right) \\
&\quad + \Delta t\,(1-\theta) \left\{ \underline{F}_k^n + \underline{F}_{k,\tau}^n - [\kappa_{k,0}\, \mathbf{A}_k(\hat{\varepsilon}_k) + \mathbf{C}\,(\underline{v}^n) + \mathbf{C}_{k,\tau}(\underline{v}^n)]\ \underline{\Phi}_k^n \right\}
\end{aligned} \tag{89}$$

Hierbei stellen die Matrizen $\mathbf{M}$ und $\mathbf{C}$ und die Vektoren $\underline{F}^i$ die gewöhnlichen Galerkinanteile (Massenmatrix, Konvektive Matrix, Quellglied) dar, mit einem Index τ versehene Terme resultieren aus der Integration über Glieder, die den upwind-Term enthalten. Die Matrix $\mathbf{A}_k$ verkörpert den diffusiven Anteil, der im Falle des SD-Verfahrens mit einer künstlichen Diffusion $\hat{\varepsilon}$ ausgestattet ist.
Die sinngemäße Übertragung der SUPG/SD-Verfahren auf die Gleichungen (86) erfordert zunächst eine Entscheidung bezüglich der Behandlung der auf der linken Seite als Faktor erscheinenden Dichte. Eine mögliche Vorgehensweise stellt die Division der Gleichungen (86) durch ϱ dar. Hierbei hebt sich die Dichte in einigen Gliedern auf, doch wird das diffusive Glied verändert, der erhaltene Operator $1/\varrho\nabla \cdot (\kappa\, \nabla)$ ist nicht symmetrisch. Die Zerlegung

$$\frac{1}{\varrho}\nabla \cdot (\kappa\, \nabla\, \Phi) \quad = \quad \nabla \cdot (\, \frac{\kappa}{\varrho}\, \nabla\Phi\,) - \kappa\,(\nabla\frac{1}{\varrho}\,) \cdot (\,\nabla\Phi) \tag{90}$$

zeigt, daß praktisch ein zusätzliches konvektives Glied mit der Konvektionsgeschwindigkeit $\vec{v}_c = \kappa \nabla(1/\varrho)$ in der Gleichung erscheint.
Eine weitere Strategie zur Behandlung der Gleichungen (86), die in den vorliegenden Untersuchungen angewandt wurde, ist durch die Einführung einer effektiven Konvektionsgeschwindigkeit

$$\vec{v}^* = \varrho \vec{v}$$

gegeben. Hierdurch erhalten die Gleichungen (86) nach der Zeitdiskretisierung die Form

$$\alpha_k \Phi_k + (\vec{v}^* \cdot \nabla)\, \Phi_k \quad = \quad \nabla \cdot \{\kappa_k \nabla \Phi_k\} + \tilde{q}_k\,, \quad k = 1, \ldots, K, \tag{91}$$

die die Anwendung der SUPG/SD-Verfahren erlaubt. In Matrixdarstellung ergibt sich folgendes diskrete System für die Größe $\underline{\Phi}_k^{n+1}$:

$$\begin{aligned}
\{\, \mathbf{M}_\chi + \mathbf{M}_{k,\tau,\chi} + \Delta t\, \theta\, [\kappa_{k,0}\, \mathbf{A}_k(\hat{\varepsilon}_{k,\chi}) + \mathbf{C}_\chi\,(\underline{v}^n) + \mathbf{C}_{k,\tau,\chi}(\underline{v}^n)]\,\}\ \underline{\Phi}_k^{n+1} \ &= \\
(\, \mathbf{M}_\chi + \mathbf{M}_{k,\tau,\chi}\,)\ \underline{\Phi}_k^n + \Delta t\, \theta\, \left(\underline{F}_k^{n+1} + \underline{F}_{k,\tau}^{n+1}\right) & \\
+\Delta t\,(1-\theta) \left\{\underline{F}_k^n + \underline{F}_{k,\tau}^n - [\kappa_{k,0}\, \mathbf{A}_k(\hat{\varepsilon}_{k,\chi}) + \mathbf{C}_\chi\,(\underline{v}^n) + \mathbf{C}_{k,\tau,\chi}(\underline{v}^n)]\ \underline{\Phi}_k^n \right\} &
\end{aligned} \tag{92}$$

Die als Faktor in mehreren Gliedern vorkommende Dichte [7] wird durch eine entsprechende Wichtung der Integrale berücksichtigt. Wie oben vereinbart, werden entsprechende Matrizen und Vektoren mit einem Index χ versehen. Resultierend aus der Konstruktion der Testfunktionen (vergl. (87))

$$w = \varphi + \tau(v^*, h, Pe_h)\, \vec{v}^* \cdot \nabla\varphi = \varphi + \chi\tau(v, h, \chi, Pe_{h,\chi})\, \vec{v} \cdot \nabla\varphi \tag{93}$$

enthalten die mit dem upwind-Parameter τ behafteten Terme zusätzliche Abhängigkeiten von der Dichte. Es gilt

$$\{\mathbf{M}_{k,\tau,\chi}\}_{ij} \quad = \quad \int_\Omega \chi^2\, \varphi_i\, \tau(v, h, \chi, Pe_{h,\chi})\, \vec{v} \cdot \nabla\varphi_j\ dV \tag{94}$$

$$\{\mathbf{C}_{k,\tau,\chi}\}_{ij} \quad = \quad \int_\Omega \chi^2\, \tau(v, h, \chi, Pe_{h,\chi})\, \vec{v} \cdot \nabla\varphi_i\, \vec{v} \cdot \nabla\varphi_j\ dV. \tag{95}$$

Auch in die Berechnung des upwind-Parameters τ fließt über die modifizierte Konvektionsgeschwindigkeit $\underline{v}^*$ die Dichte ein.

Die Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder (siehe Abschnitt 4.1.3) gibt Anlaß eine weitere Modifikation der Behandlung der skalaren Transportgleichungen in Betracht zu ziehen. Wählt man nämlich (im Falle von $\nabla \cdot \vec{v} = 0$) die Form (86) als Ausgangspunkt der Diskretisierung, so entsteht gegenüber (85) ein (wenn auch kleiner) systematischer Fehler, da die substantielle Ableitung der Dichte $\frac{D\varrho}{Dt}$ i.a. nicht exakt verschwindet.

[7] Wie in Abschnitt 4.1.1 vereinbart, soll hierfür vorerst eine mittlere Dichte im Zeitschritt stehen.

Anstelle von (86) kann jedoch

$$\left\{\frac{\partial(\varrho\,\Phi_k)}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,(\varrho\,\Phi_k)\right\} \quad = \quad \nabla\cdot\{\kappa_k\,\nabla\Phi_k\} + \varrho\,q_k\,, \quad k = 1,\ldots,K, \tag{96}$$

als Ausgangsbeziehung verwendet werden. In Bezug auf die Gleichung (96) bietet es sich an, die Substitution $\Phi^* = \varrho\Phi$ vorzunehmen und Φ^* als gesuchte Funktion zu betrachten. Bei der Diskretisierung stößt man allerdings erneut auf Probleme der Behandlung des diffusiven Gliedes. Wie bereits oben gesehen (siehe Gleichung (90)), führt eine Umformung des Diffusionstermes

$$\nabla\cdot(\kappa\,\nabla\,\Phi) \quad = \quad \nabla\cdot(\frac{\kappa}{\varrho},\nabla(\varrho\,\Phi)) - \nabla(\frac{\kappa}{\varrho^2}(\varrho\,\Phi)\nabla\varrho). \tag{97}$$

zu zusätzlichen Gliedern in der Transportgleichung. Hierbei erzeugt der rechte Term in (97) nach Ausdifferenzieren je einen zusätzlichen konvektiven und reaktiven Anteil.

4.3 Bemerkungen zur Implementierung des Verfahrens

Die in den Abschnitten 4.1 und 4.2 beschriebenen Algorithmen stellen Verallgemeinerungen zu dem ursprünglich verwendeten Verfahren für inkompressible Medien ([GMM94]) dar. Damit sind die Routinen zur Generierung von Matrizen und Vektoren, die für den inkompressiblen Fall vorliegen, weitgehend nutzbar. Gleiches gilt für die Lösungsmodule für lineare Gleichungssysteme. Es kommen vorkonditionierte CG-Verfahren zur Anwendung, die für MIMD-Parallelrechner effektiv implementiert sind ([HHMP94], [HLM92]). Die Systemmatrizen des Projektionsschrittes (68, 83), der den höchsten Lösungsaufwand verursacht, sind symmetrisch und spektral äquivalent zum diskreten Laplacian. Es konnten daher hierarchische Verfahren zur Vorkonditionierung dieser Matrizen eingesetzt werden ([GIMM94]).
Die Implementierung des Algorithmus erfolgte (vorerst ausschließlich) in der vorhandenen Programmstruktur des 2D-Simulationssystems "CF2D".
Die Aktivierung des dichtevariablen Programmzweiges wird über das Setzen einer logischen Variablen **densi** = $.TRUE.$ im Benutzerhauptmenü gesteuert.
Alle bei der Implementierung des Verfahrens notwendigen Änderungen des Programmsystemes wurden für eine spätere Übertragung in das 3D-System dokumentiert.
Bei Anwendung der Verfahren mit variabler Dichte ergibt sich generell ein erhöhter Rechenaufwand pro Zeitschritt. Bestimmt wird dieser einerseits durch konkrete Einstellungen im Algorithmus, etwa hinsichtlich der Anzahl der ausgeführten Iterationen. Im Falle der Einbeziehung der vollständigen Kontinuitätsgleichung erscheint die gemischte Massenmatrix $\hat{\mathbf{M}}$ als neue zu assemblierende Struktur. Für die Dichtefunktion und deren Ableitung sind insgesamt vier neue Vektoren mitzuführen und aufzudatieren. Da die Dichte als aufzudatierende Funktion in praktisch alle zu berechnenden Terme eingeht, müssen für jede Iteration innerhalb eines Zeitschrittes *sämtliche* Matrizen und Vektoren neu berechnet werden. Damit entfällt die im inkompressiblen Fall vorher genutzte Vereinfachung der Assemblierung

für Folgeiterationen.
Die erarbeiteten Programme sind in die Softwareplattform des SFB 393 integriert und sowohl auf verschiedenen MIMD-Parallelrechnern als auch auf Workstations lauffähig. Erste Rechenergebnisse liegen für den speziellen Anwendungsfall einer Wasserstofflamme und für das akademische Beispiel einer dichtegetriebenen Vermischung zweier Fluide vor.

5 Ergebnisse von Testrechnungen

Zur Untersuchung der Funktionalität und Eigenschaften der vorgestellten Algorithmen sowie auch zur Fehlersuche sind eine Anzahl numerischer Testrechnungen durchgeführt worden. Im weiteren soll kurz über einige Ergebnisse dieser Untersuchungen berichtet werden. Die Resultate der Rechnungen gaben und geben z.T. Anlaß, auch kritisch über die gewählte Vorgehensweise nachzudenken. Einige Schlußfolgerungen sind im Text gezogen, andere sich aufdrängende Fragen sind noch unbeantwortet.

5.1 Dichtegetriebene Strömung in einem abgeschlossenen Gebiet

Studiert wird die Strömung in einem quadratischen ebenen Gebiet Ω, die beim konvektiven und diffusiven Vermischen zweier Fluide mit unterschiedlicher Dichte unter Schwerkrafteinfluß auftritt. Als Ausgangskonstellation wird eine verschwindende Strömungsgeschwindigkeit und eine völlige Trennung der beiden Medien in der rechten und linken Hemisphäre des Gebietes Ω (siehe Abb. 1) angenommen. Die beschriebene, etwas hypothetische Situation würde sich nach dem schlagartigen berührungslosen Entfernen einer Trennwand zwischen den beiden Medien einstellen. Der höhere Schweredruck auf der Seite des dichteren Fluids

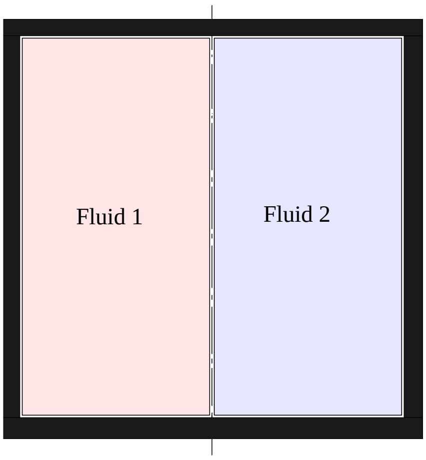

Abbildung 1: Ausgangssituation einer dichtegetriebenen Strömung im geschlossen Gebiet

induziert im unteren Teil des Gebietes eine Bewegung in Richtung des leichteren Fluids.

Im oberen Teil des Gebietes entwickelt sich eine Strömung in die umgekehrte Richtung. Diesem konvektiven Stofftransport ist die diffusive Vermischung der beiden Fluide überlagert. Die durch die Anfangsverteilung bedingten dynamischen Ungleichgewichte klingen unter heftigen Schwankungsbewegungen nach wenigen Sekunden ab und hinterlassen eine relativ stabile Dichteschichtung, in der nur noch schwache Strömungen existieren und ein langsamer Konzentrationsausgleich stattfindet.
Instationäre Vorgänge dieser Art lassen sich am besten durch eine filmartige Darstellung erfassen, wobei zahlreiche gespeicherte Einzelbilder zu einer mpeg-Animation verarbeitet werden, siehe hierzu ([MP97]).
Für eine detaillierte Auswertung ist es erforderlich, den zeitlichen Verlauf von Strömungsgrößen an ausgewählten Punkten des Lösungsgebietes aufzuzeichnen. In der folgenden kurzen Ergebnisdiskussion beschränken wir uns auf den qualitativen Vergleich von berechneten Verteilungen von Feldgrößen zu bestimmten Zeitpunkten.
Einen Einblick in den Ablauf des Vorganges gibt eine Sequenz von Dichteverteilungen in Abbildung 2. Die Simulation dieses Testbeispieles erfordert, neben der Berechnung des

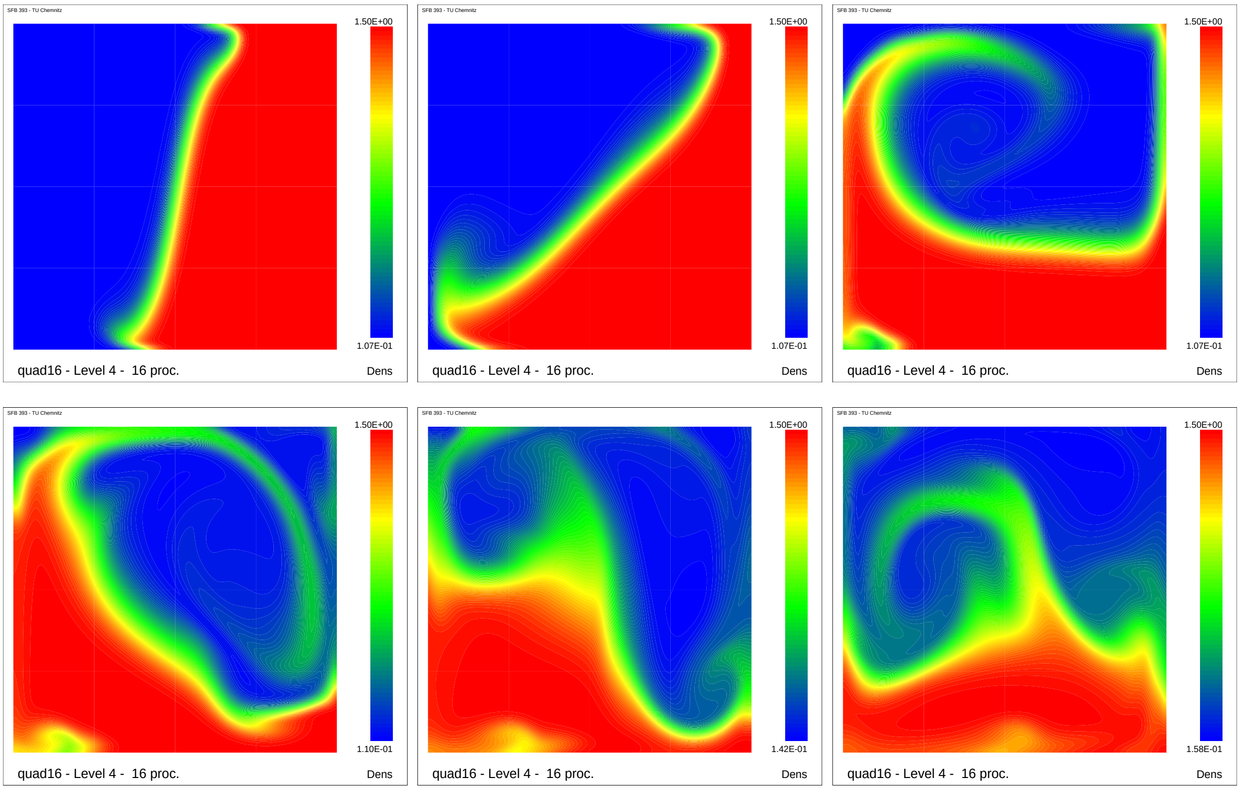

Abbildung 2: Dichtegetriebenen Strömung, Dichte nach $t = .05, .10, .20, .30, .40, .50$

Strömungsfeldes, die Betrachtung der Transportgleichung für die Konzentration eines der beiden Fluide. Thermische Effekte spielen hier keine Rolle.
Die dokumentierten Rechnungen wurden auf einem gleichmäßigen Rechteckgitter mit 4225,

16641 bzw. 66049 Knotenpunkten und Zeitschrittweiten zwischen $10^{-2}s$ und $10^{-4}s$ erzielt. Numerisch stellt bei diesem Beispiel besonders die zeitliche Anlaufphase eine Herausforderung dar, da sehr steile Gradienten der Konzentrationen und damit auch lokal starke temporäre Änderungen der Dichte auftreten. Numerische Fehler bei der Approximation der Dichte wirken über den Projektionsschritt (68) auf die Druck- und Geschwindigkeitsverteilung zurück. Das in Abschitt 4.1 beschriebene iterative Verfahren zeigt in diesem Bereich erhebliche Konvergenzprobleme.
Leider kann, wie bereits oben dargelegt, die Konvergenz des Verfahrens *nicht* durch Reduzierung des Zeitschrittes Δt forciert werden, sondern sie geht u.U. sogar verloren.
Zur Verringerung des unmittelbaren Einflusses lokaler Dichteschwankungen in (68) wurde in Testrechnungen der Term $\hat{\mathbf{M}}\underline{\chi}_t$ mit einem Dämpfungsfaktor ϵ $(0.0 < \epsilon \leq 1.0)$ versehen. Obgleich diese Dämpfung nur in der unmittelbaren Startphase des Vorganges $(t < 0.1)$ wirksam war, bewirkte sie jedoch eine nachhaltige Verfälschung der Ergebnisse. Interessant ist hier ein Vergleich mit den Resultaten bei völliger Vernachlässigung der Dichteableitung (inelastisches Modell, siehe (9)). In Abbildung 3 sind Momentaufnahmen der Dichteverteilung aus diesen Untersuchungen gegenübergestellt, wobei in der ersten Bildspalte Ergebnisse einer reproduzierbaren Simulation mit der vollständigen Beziehung (68) dargestellt sind. Die Anzahl s_n der pro Zeitschritt ausgeführten Iterationen (siehe Abschnitt 4.1) hatte bei den Testrechnungen keinen signifikanten Einfluß auf die Langzeitergebnisse der Simulationen. Selbst für relativ große Zeitintervalle (mehrere Hundert Zeitschritte) betragen hieraus resultierende Differenzen nur wenige Prozent. Eine Ausnahme bildet wiederum die Startphase der Rechnung $(t < 0.03)$, wo bedingt durch Konvergenzprobleme, temporär eine deutliche Abhängigkeit der Rechenergebnisse von der Anzahl der nichtlinearen Iterationen vorliegt.
Die Resultate von Rechnungen unter Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder (siehe Abschnitt 4.1.3) zeigen qualitativ starke Übereinstimmung zu den Rechenergebnissen, die unter Berücksichtigung der vollständigen Kontinuitätsgleichung (68) erzielt wurden. Quantitativ treten allerdings gewisse Abweichungen auf, die bei den Testrechnungen maximal etwa 10% erreichten.
Spezielle Aufmerksamkeit galt der Frage der integralen Masseerhaltung im geschlossenen Gebiet Ω, da diese u.a. auch die Erfüllung der Orthogonalitätsbedingung (78) tangiert. In den vorliegenden Testrechnungen zeigte sich, daß die numerischen Fehler in der Massenbilanz fast durchweg ein Masse*defizit* bewirken.
Eine Erklärung für diesen Vorzeicheneffekt steht noch aus.
Der beobachtete Massendefekt erweist sich als abhängig von der Wahl des Zeitschrittes,von der Anzahl der nichtlinearen Iterationen und besonders stark auch vom Dichtequotienten der beiden Fluidkomponenten. Wenig oder keinen Einfluß auf diesen Fehler haben dagegen die Netzfeinheit und die konkrete Wahl des Stabilisierungsverfahrens für die Transportgleichung (SUPG/SD).
Bei Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeiten erscheint der Effekt etwas stärker ausgeprägt als bei der Rechnung mit der vollständigen Kontinuitätsgleichung (68) und kann iterativ nicht vollständig abgebaut werden. Letzteres ist nicht überraschend, da wegen der erfolgten Approximation der Kontinuitätsgleichung ($\nabla\vec{v}$ ist in Wirklichkeit nicht ex-

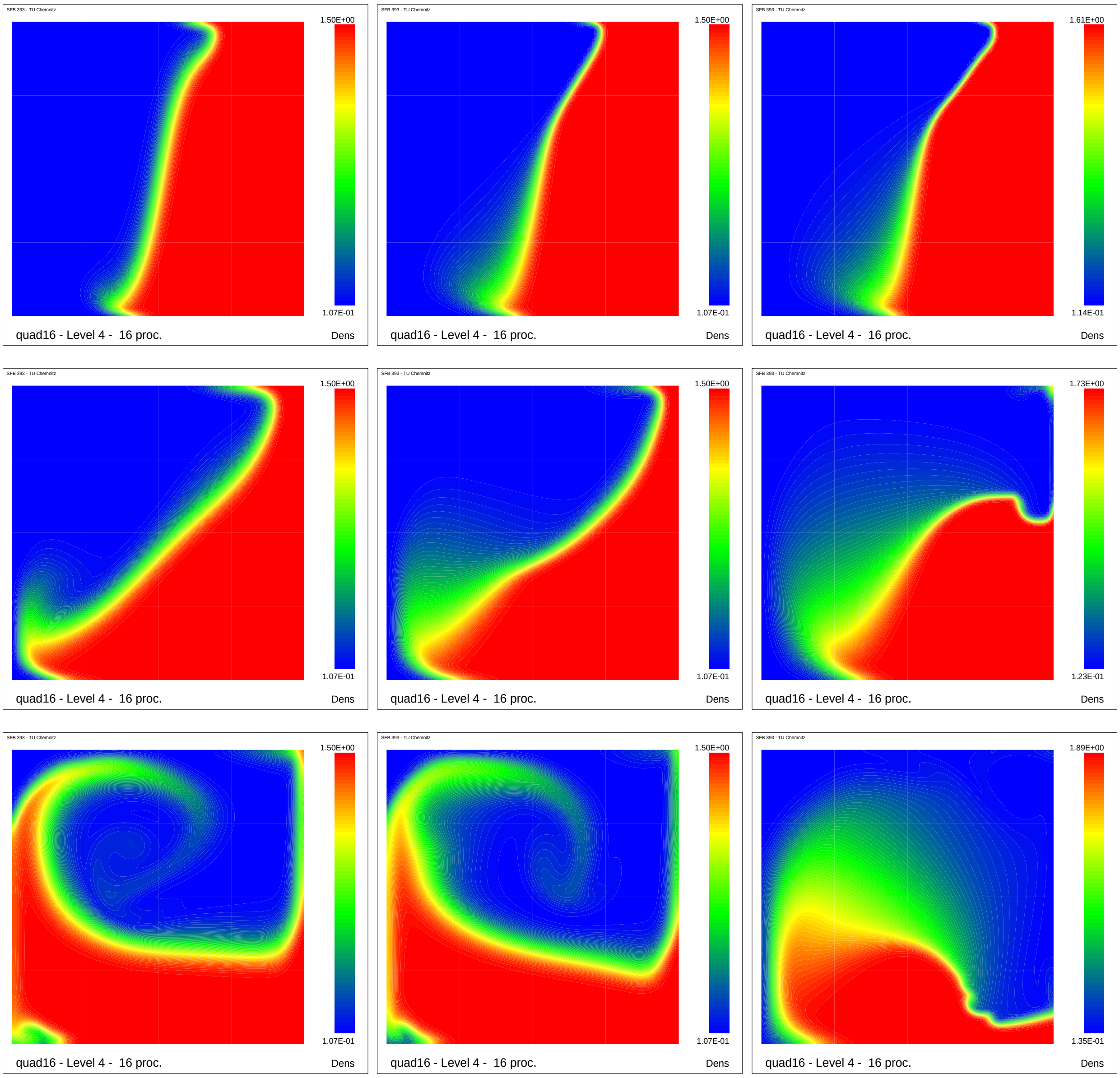

Abbildung 3:
Dichtegetriebene Strömung, Dichte nach $t = .05, .10, .20$
links: Approximation mit $\partial\varrho/\partial t + \nabla \cdot (\varrho \underline{v}) = 0$,
mitte: wie links, aber mit initialer Dämpfung der Dichteableitung,
rechts: Approximation mit $\nabla \cdot (\varrho \underline{v}) = 0$

akt Null, siehe hierzu die Beziehung (53)) und der nicht konservativen Behandlung der Transportgleichungen für die Spezieskomponenten (siehe Abschnitt (4.2)) ein Fehler in der Massenbilanz modellbedingt entsteht.
Einen quantitativen Eindruck von auftretenden Defekten gibt die Tabelle 1. Die Messun-

Variante						Zeitschritt Δt			
Netz	ϱ_1/ϱ_2	Var.	SUPG/SD	Iter.		.002	.001	.0005	.00025
1	9.	2	SUPG	1			.00476		
2	9.	1	SUPG	1		.00785	.00547	.00365	.00289
2	9.	2	SUPG	1		.00813	.00547	.00380	.00332
3	9.	2	SUPG	1			.00561		
1	9.	2	SD	1			.00783		
1	9.	1	SD	1			.00546	.00334	.00191
1	9.	1	SD	5			.00301	.00164	.00104
2	9.	1	SD	1		.00520	.00296	.00166	.00132
2	9.	1	SD	2		.00117	.00430	.00242	.00110
2	9.	1	SD	3		.00415	.00075	-.00023	-.00055
2	9.	1	SD	5		.00366	.00140	.00037	-.00051
2	9.	2	SD	1		.00902	.00724	.00627	.00577
2	9.	2	SD	2		.00598	.00461	.00337	.00279
2	9.	2	SD	3		.00560	.00398	.00270	.00212
3	9.	2	SD	1		.00869	.00651	.00525	.00457
2	1.56	1	SD	1		.00005	.00003	.00002	.00001
2	1.56	1	SD	2		.00001	.00001	.00000	.00000
2	1.56	2	SD	1		.00018	.00017	.00017	
2	1.56	2	SD	2		.00009	.00008	.00007	

Testbeispiel	:	quad16
Variante 1	:	Projektionsverfahren mit (68)
Variante 2	:	Projektionsverfahren mit $\nabla\vec{v} = 0$
Netz 1	:	1024 Elemente, 4225 Knoten, uniform
Netz 2	:	4096 Elemente, 16641 Knoten, uniform
Netz 3	:	16386 Elemente, 66049 Knoten, uniform

Tabelle 1: Integraler Massendefekt (bezogen auf die Gesamtmasse) für das Zeitintervall $[0.05, 0.06]$

gen für die Variante 1 erwiesen sich als etwas schwieriger, da die Massenbilanz sensibel auf die verwendete Startkonfiguration für das Zeitintervall $[0.05, 0.06]$ reagierte, und daher die Frage entstand, was eine faire Startkonstellation für eine gegebene Parameterwahl (Iterationszahl, Zeitschrittweite) darstellt. Letztlich wurde sich dafür entschieden, das im Meßintervall $[0.05, 0.06]$ verwendete Regime in Verlaufe der gesamten Rechnung $(0.0 \leq t \leq 0.06)$

beizubehalten. Das etwas chaotische Verhalten der Daten (Variante 1) läßt sich durch die oben erwähnten Konvergenzprobleme in der Startphase der Rechnung erklären, die in ihrer Ausprägung auch von der Wahl der o.g. Parameter abhängig sind.
Das beobachtete Verhalten (Tabelle 1) zeigt, daß der Massendefekt sowohl die Kopplungseffekte zwischen dem Strömungs- und den Transportproblemen (gekennzeichnet durch die Anzahl der Iterationen) als auch die Zeitdiskretisierung, die von 1. Ordnung ist, widerspiegelt. Der Gesamtdefekt kann sich, wie ersichtlich, in einem längeren Zeitintervall zu einem erheblichen Fehler akkumulieren, besonders dann, wenn der Dichtequotient der Komponenten stark vom Wert 1 abweicht. Im konkreten Anwendungsfalle muß entschieden werden, welche Parameterwahl (Iterationszahl, Zeitschrittweite) eine akzeptable Approximation der Massenbilanz sicherstellt. In Abhängigkeit von den Genauigkeitanforderungen erhöht sich damit ggf. der Rechenaufwand für ein Simulationszeitintervall.
Dem sich aufbauenden Massendefekt kann auch durch eine entsprechende multiplikative Korrektur der Dichte in jedem Zeitschritt entgegengewirkt werden. Dies kommt praktisch der Berechnung eines neuen thermodynamischen Druckes p_T unter Anwendung des Kriteriums (80) gleich. Die damit einhergehende stetige Erhöhung von p_T wiederspricht aber zum einen der für isotherme Vorgänge geltenden Beziehung (39), zum anderen führt diese Vorgehensweise bei großen Abweichungen von der Massenkonstanz zu unphysikalischen Dichteverteilungen.

5.2 Diffusionsflamme

In einer weiteren Reihe von Testrechnungen wurden thermische Effekte in die Untersuchungen einbezogen. Mit der Hinzunahme der Temperatur eröffnet sich eine ganze Palette praktisch interessanter Aufgaben. Neben verschiedenen Wärmetransportvorgängen besitzen Problemstellungen, deren Wärmehaushalt von chemischen Reaktionen geprägt ist, eine besondere Bedeutung unter den betrachteten Strömungsvorgängen mit niedriger Machzahl. Im Rahmen von Untersuchungen von Verbrennungsvorgängen, die gemeinsam mit dem Institut für Feuerwehr Sachsen-Anhalt durchgeführt wurden (siehe z.B. [MMIKG93]), ist in letzter Zeit die Betrachtung von Wasserstoff-Diffusionsflammen stärker in den Vordergrund gerückt ([GWKKS96]). Das weitergesteckte Ziel dieser Untersuchungen ist die Aufklärung des Flammenverhaltens unter verschiedenen Umgebungsbedingungen, u.a. bei Mikrogravitation.
Im vorliegenden Modell strömt der Brennstoff durch eine zentral angeordnete Düse in eine rotationssymmetrische oder ebene Brennkammer. Die Luft wird durch eine konzentrische Öffnung zugeführt. Am oberen Teil der Brennkammer ist eine zentrale Austrittsöffnung vorgesehen. An dieser Öffnung kommt es im praktischen Falle zu erheblichen Übergeschwindigkeiten und Wirbelbildungen, so daß zunächst vereinfachend eine oben offene Kammer betrachtet wird.
Eine schematische Darstellung der Brennkammergeometrie, die für die angestellten Berechnungen verwendet wurde, zeigt Abbildung 4. Die Zuströmgeschwindigkeiten wurden so gewählt, daß auch unter Berücksichtigung der lokalen Beschleunigung der Strömung noch laminare Verhältnisse angenommen werden können.

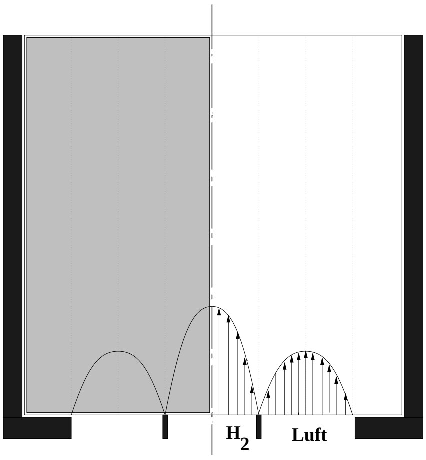

Abbildung 4: Lösungsgebiet für Strömungsuntersuchung in einer Brennkammer

Die chemische Reaktion wurde als Einschrittreaktion 2.Ordnung

$$F + s_o\, O \longrightarrow s_p\, P$$

betrachtet [8]. Für die Bildungsrate des Verbrennungsproduktes $\dot{m}$ gelangen Arrhenius-ansätze zur Anwendung (98).

$$\dot{m} \;=\; \varrho\, A_g\, e^{-\frac{E_g}{RT}}\, y_o\, y_f \tag{98}$$

$\dot{m}$ weist ersichtlich eine stark nichtlineare Abhängigkeit von der Temperatur auf. Sie erscheint in den Quellgliedern der Transportgleichungen (4) für die Konzentrationen

$$\begin{aligned} q_f &= -\varrho\, \dot{m}\,, \\ q_o &= -\varrho\, s_o\, \frac{M_o}{M_f}\, \dot{m}\,, \\ q_p &= +\varrho\, s_p\, \frac{M_p}{M_f}\, \dot{m}\,, \end{aligned}$$

und bestimmt das Wärmequellglied Q in der Energiegleichung (3):

$$Q \;=\; \Delta H\, \varrho\, \dot{m}$$

In den aufgeschriebenen Formeln stellen die Größen M_o, M_p, und M_f die Molekulargewichte der Spezieskomponenten dar, E_g ist eine Aktivierungsenergie, ΔH die spezifische Energie sowie A_g ein weiterer Stoffparameter.
Die Bilanzgleichungen für die Strömung sowie den Energie- und den Massetransport bilden

[8] Mit F, O, P werden Brennstoff (fuel), Sauerstoff (oxygene) und Verbrennungsprudukt (product) symbolisiert, s_o, s_p bezeichnen stöchiometrische Koeffizienten.

ein gekoppeltes System von 7 Differentialgleichungen (siehe (1),...,(5), wobei $N = 4$ gilt). Der modellierte physikalische Vorgang ist durch eine hohe Eigendynamik und teilweise sehr scharfe Grenzschichten gekennzeichnet. In den kritischen Bereichen ist eine relativ feine Vernetzung erforderlich, die idealerweise durch ein adaptives Verfahren bereitgestellt werden sollte. Aufgrund der sehr schnellen und komplexen Änderungen des Lösungsverhaltens und der Lage der Grenzschichten stellt diese Simulationaufgabe jedoch hohe Ansprüche an ein solches Verfahren. Die Notwendigkeit häufiger Netzanpassungen und die temporär zunehmende räumliche Ausdehnung der Grenzschichten begrenzen andererseits den zu erwartenden Effektivitätsgewinn.
Gegenwärtig erfolgen Vorarbeiten zur Entwicklung eines auch für instationäre Probleme geeigneten adaptiven Verfahrens, ein voll funktionsfähiger Algorithmus ist jedoch noch nicht verfügbar.
Die vorgestellten Untersuchungen wurden mit einem gleichmäßigen FEM-Netz bei verschiedenen Verfeinerungsstufen durchgeführt. Es erwies sich hierbei als sinnvoll, in beiden Raumrichtungen die gleiche Gitterweite zu wählen, da die zahlreich auftretenden Grenzschichten keine Vorzugsrichtung aufweisen. Als eine ausreichende Ortsschrittweite wurde $\Delta x = \Delta y = 0.625mm$ (grobes Netz) ermittelt. Eine nochmalige Halbierung der Gitterschrittweite (feines Netz) beeinflußt die numerischen Ergebnisse nochmals im einstelligen Prozentbereich, demgegenüber erscheint der betrachtete Vorgang qualitativ bereits auf groberen Netz beschrieben. Bei einer Gebietsgröße von 80mm x 300 mm ergeben sich bei der groberen Vernetzung 62065 Knotenpunkte.
Die zu wählende Zeitschrittweite Δt ist vorzugsweise von den örtlichen Maximalgeschwindigkeiten und von der Ortsdiskretisierung abhängig. In fortgeschrittenen Stadien der betrachteten Simulationsaufgabe erwies es sich mitunter als schwierig, die Konvergenz der iterativen Löser (CGS) für die unsymmetrischen Systeme der Transportgleichungen zu gewährleisten. Daraus resultierte eine zusätzliche Beschränkungung der Zeitschrittweite. In den konkreten Rechnungen verwendete Zeitschrittweiten lagen im Bereich von $\Delta t = 0.002s, ..., 0.00025s$.
Im Abb. (5) werden Ergebnisse gegenübergestellt, die bei unterschiedlicher Behandlung des Problems der veränderlichen Dichte erzielt wurden [9]. Man erkennt einerseits erhebliche Abweichungen der Ergebnisse bei der Anwendung eines Boussinesq-Modelles von den Resultaten, die mittels einer low-Mach-number-Approximation berechnet wurden. Erstaunlicherweise zeigt sich, daß bei Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder Ergebnisse erzielt werden, die quantitativ nur moderat und qualitativ kaum von den unter Einbeziehung der vollständigen Kontinuitätsgleichung berechneten abweichen (Bild 5, links). Die beobachtete Übereinstimmung zeigt, daß auch bei Aufgaben mit starken (durch chemische Reaktionen bedingten) Wärmequellen, die Annahme divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder brauchbare Ergebnisse liefern kann und die auftretenden Fehler offenbar lokal beschränkt bleiben.
Im Falle des Verfahrens mit der vollständigen Kontinuitätsgleichung traten wiederum die bereits diskutierten Konvergenzprobleme, vor allem in der Startphase des Vorganges, auf.

[9] Diese Tests wurden mit dem kleineren Lösungsgebiet (Abb. 4) durchgeführt.

Neben den rein numerischen Aussagen ist auch die physikalische Interpretation der Resultate in Bezug auf die Simulation von Diffusionsflammen von Interesse. Aus experimentellen und numerischen Untersuchungen (siehe z. B. [KGM94] und die dort zitierte Literatur) ist bekannt, daß die auftriebsgetriebene Strömung um die Flamme i.a. nicht stationär ist, sondern mit einer festen Frequenz von ca. 11-15 Hz oszilliert (flame flicker). Diese Oszillation wird ursächlich von der Auftriebskraft bestimmt und erweist sich als relativ unabhängig von den weiteren konkreten Modellparametern. Die innere Scherströmung der Flamme erzeugt eine zusätzliche Instabilität, deren Frequenz etwa 300-400 Hz in Austrittsnähe erreicht und deutlich niedriger liegt in einiger Entfernung vom Austritt.
Die Beobachtung beider Erscheinungen setzt eine quasiausgebildete Strömung voraus, an der die genannten Periodizitäten ablesbar sind. Da die numerischen Experimente mit der Anfangsverteilung eines kalten luftgefüllten Gebietes einsetzen, ist ein (problemabhängiges) Zeitintervall von mehreren Sekunden zu simulieren, bis ein gewisser Gleichgewichtszustand im Vorgang zu erwarten ist.
Bei der Untersuchung des Vorganges eingeschränkt auf ein relativ kleines Lösungsgebiet (siehe Abb. 5, Gebietsgröße 40 mm x 80 mm) zeigte sich, daß die berechneten Feldgrößen nach einigen Sekunden zu stationären Werten tendierten. Dies legte die Vermutung nahe, daß periodischen Bewegungen durch die Nähe des Gebietsrandes gedämpft bzw. unterdrückt werden. Die Einbeziehung größerer Lösungsgebiete Ω bestätigte diese Hypothese nachdrücklich: Die berechneten Lösungsverläufe zeigten nun dauerhaft instationären Charakter und tendierten zu einem periodischen Verhalten.
Allerdings trat in den erweiterten Lösungsgebieten eine markante Erscheinung zu Tage, die Anlaß zu weitergehenden Untersuchungen gab. In der Anfangsphase des simulierten Vorganges wird zunächst eine pilzförmige Struktur, bestehend aus heißen Gasen, ausgebildet und im Gebiet nach oben befördert. Hierbei wird eine relativ intensive Vertikalströmung nahe der Symmetrieachse begleitet von einer sich ausprägenden seitlichen Wirbelstruktur. Während die Kernströmung den oberen Gebietsrand durchquert überschreitet das Zentrum der Wirbelstruktur den oberen Austrittsrand nicht (siehe Abb. 6).
Dieses Verhalten wurde bei der Berechnung weiterer Strömungen mit transportierten Wirbelstrukturen (z.B. bei der von Karmanschen Wirbelstraße) bisher noch nicht beobachtet. Der unphysikalische Charakter der Erscheinung wird erhärtet durch die Betrachtung eines in vertikaler Richtung auf die doppelte Länge erweiterten Gebietes: Der markante Wirbel bewegt sich stetig bis in die Nähe des neuen Gebietsrandes und verharrt dort. Als mögliche Ursache für diese problematische Erscheinung wurde zunächst die in dichteveräderlicher Strömung erfolgte Berücksichtigung der vollständigen viskosen Matrix in der Impulsgleichung (siehe (21) bzw. (66)) gesehen. Die verwendete Darstellung des viskosen Gliedes beeinflußt bekanntlich maßgeblich die Form der natürlichen Randbedingung für die Geschwindigkeit am Austritt.
Testrechnungen mit einer (auf den inkompressiblen Fall mit konstanter Viskosität) reduzierten viskosen Matrix zeigten jedoch, daß der gleiche Staueffekt in Bezug auf die Wirbelstruktur auftritt. Ebenso liefert die Betrachtung des rotationssymmetrischen Modelles qualitativ das gleiche Ergebnis.
Es liegt daher die Schlußfolgerung nahe, daß die (bekanntlich sehr häufig) verwendete

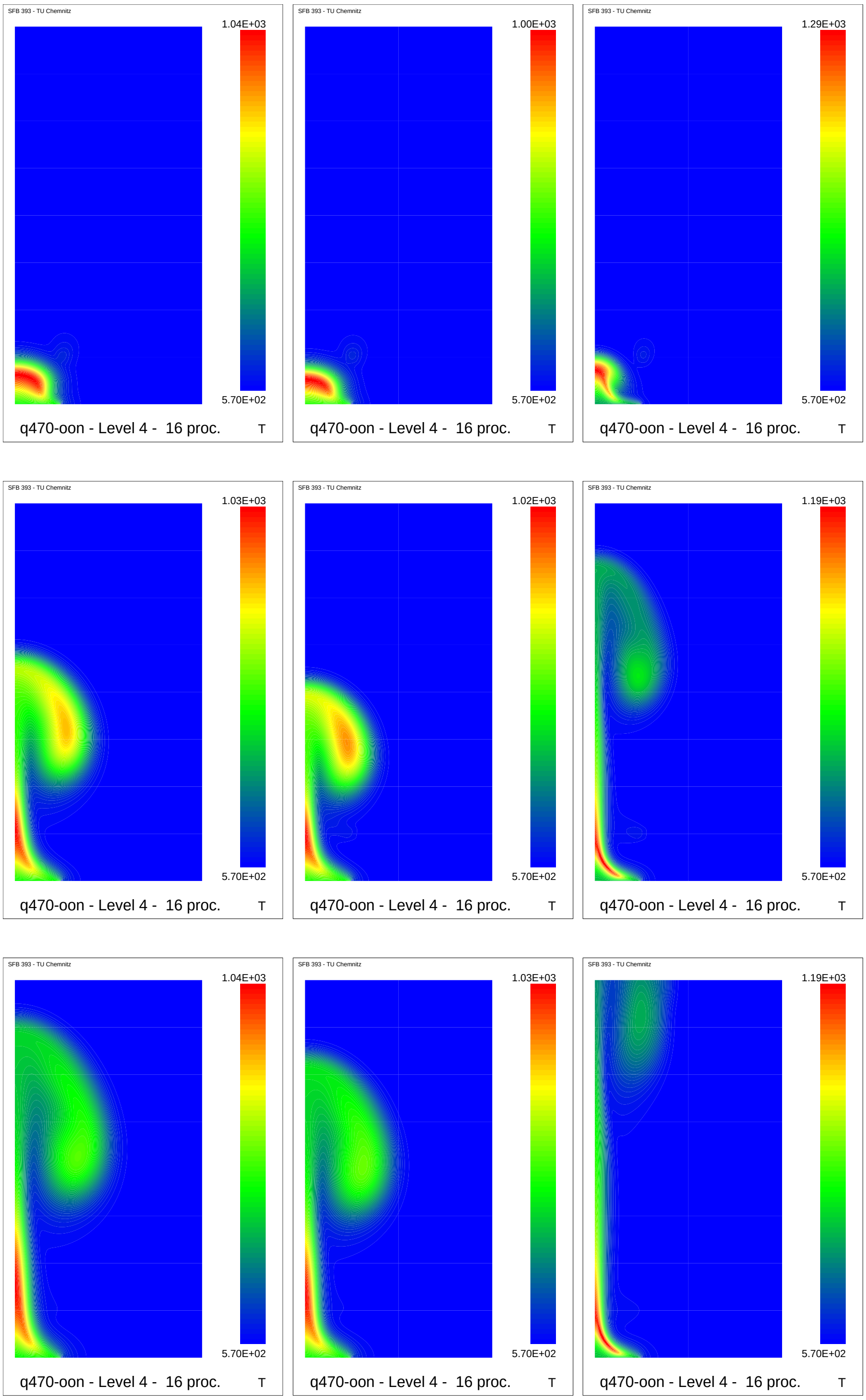

Abbildung 5: Wasserstoff-Diffusionsflamme, Temperaturverteilung nach t=.10,.30,.40
links: low-Mach-number-Approximation mit $\partial\varrho/\partial t + \nabla\cdot(\varrho\underline{u}) = 0$,
mitte: low-Mach-number Approximation mit $\nabla\cdot\underline{u} = 0$,
rechts: Boussinesq-Approximation

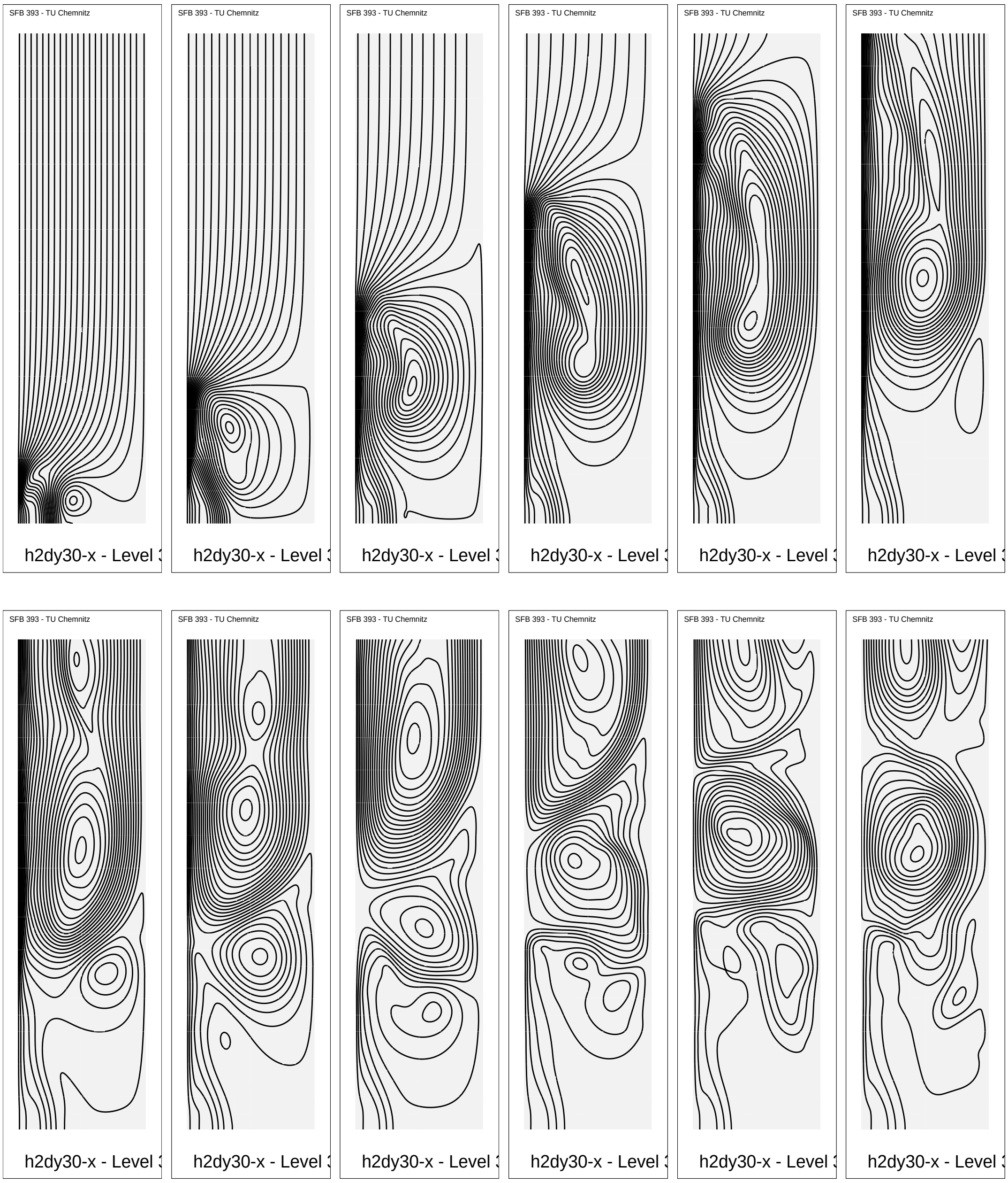

Abbildung 6: Stromlinienbilder nach t=.10,.20,.30,.40,.50,.60,.70,.80,.90,1.00 s im großen Lösungsgebiet

natürliche Randbedingung für die Geschwindigkeit an Austrittsrändern, die durch einfaches Nullsetzen des Integales über die Spannungsterme ((99), $P_j = 0$) gekennzeichnet ist, in der vorliegenden Strömungssituation versagt.

$$\int_{\Gamma_2} \left[-p\delta_{ij} + \eta(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}) - \frac{2}{3}\eta \frac{\partial v_k}{\partial x_k}\delta_{ij} \right] n_i w^{(j)} \; d\Gamma \quad = \int_{\Gamma_2} P_j w^{(j)} \; d\Gamma \tag{99}$$

Die (relativ schwache) Auftriebskraft, die die seitliche Wirbelstruktur nach oben bewegt, reicht offenbar nicht aus, daß diese den Gebietsrand durchschreitet. Daß von der Austrittsrandbedingung ((99) mit $P_j = 0$) eine blockierende Wirkung auf transportierte Wirbelstrukturen ausgeht, erscheint andererseits einleuchtend: Die hierdurch vorgegebene Bedingung an die Geschwindigkeitsgradienten wird bei Annäherung einer Wirbelstruktur an den Rand Γ_2 immer weniger erfüllt, was entweder zur Nivellierung oder zur Blockierung dieser Struktur führen kann. Im vorliegenden Falle erweist sich der beschriebene Effekt als besonders nachteilig, da über eine sich entwickelnde Kaskade von Sekundärwirbeln erhebliche Rückwirkungen auf weite Teile des Lösungsgebietes entstehen.
Die weitere Entwicklung der Strömung ist dadurch gekennzeichnet, daß sich der seitliche Wirbel, der von der Kernströmung offenbar angetrieben wird, ausprägt und weitere Sekundärwirbel induziert. Die Kernströmung zeigt zudem ein periodisches Verhalten, wobei sich eine Überlagerung höherer und niedrigerer Frequenzen erkennen läßt. Eine Abschätzung der langwelligen Impulse ergab Werte von ca. 7-10 Hz. Damit liegt die Pulsation offensichtlich unter den in Experimenten beobachteten Frequenzen von 11-15 Hz ([KGM94]). Als Ursachen für diese Abweichungen kommen neben den numerisch bedingten Einflüssen auch Modellierungsaspekte in Betracht, die an dieser Stelle nicht erschöpfend diskutiert werden können. (Unter anderen spielen solche Fragen wie die Berücksichtigung einer temperatur- und konzentrationsabhängigen Viskosität eine Rolle. Auch die in die Beschreibung der Quellglieder eingehenden Parameter (E_g, ΔH, A_g) beeinflussen das Lösungverhalten.)

Die Tabelle 2 zeigt gemessene Rechenzeiten für die Ausführung eines Zeitschrittes (ohne Iteration) auf dem Parallelrechner Parsytec GC128 und auf einem Pentium III-Cluster (500 MHz). Zur besseren Interpretation wurden die Anteile für die Assemblierung und für die Lösung der Gleichungssysteme (Projektionsschritt, 5 symmetrische bzw. unsymmetrische Systeme) an der Gesamtrechenzeit getrennt dargestellt.
Erwartungsgemäß halbiert sich die zur Assemblierung benötigte Rechenzeit jeweils mit Verdopplung der Anzahl der verwendeten Prozessoren, da dieser Prozess vollständig parallel gestaltet ist. Demgegenüber nimmt das Gewicht der zur Lösung der Gleichungssyteme beanspruchten Rechenzeit mit Erhöhung der Prozessoranzahl erheblich zu.
Die Aussagekraft der angestellten Vergleiche wird allerdings durch bestimmte Faktoren beeinträchtigt. Zum einen behindert die eingeschränkte Hauptspeicherausstattung des zunächst eingesetzten Rechnersystems GC128 (32 MB pro Knoten) die Behandlung größerer Beispiele auf kleineren Prozessorenclustern (im konkreten Falle sind ca. 16000 Netzknoten pro

				CPU - Zeiten (in s)			
Levels	Knoten	Proz.		Assembl.	CG (p)	CG (5)	Gesamt
1	3997	64 (GC)		0.15	4.62	3.29	8.26
2	15673	64 (GC)		0.60	6.49	2.48	9.77
3	62065	64 (GC)		2.43	9.07	3.09	14.8
4	247009	64 (GC)		9.79	16.6	12.2	38.9
5	985537	64 (GC)		39.3	38.7	121.1	199.8
1	3997	32 (GC)		0.30	3.65	2.82	6.95
2	15673	32 (GC)		1.21	5.43	2.02	8.95
3	62065	32 (GC)		4.87	8.47	3.00	16.6
4	247009	32 (GC)		19.6	18.1	14.7	52.8
1	3997	16 (GC)		0.60	2.85	2.21	5.81
2	15673	16 (GC)		2.43	4.48	1.88	8.96
3	62065	16 (GC)		9.75	8.27	3.17	21.5
4	247009	16 (GC)		39.1	22.6	21.7	84.1
1	3997	8 (GC)		1.12	2.23	1.73	5.21
2	15673	8 (GC)		4.54	4.02	1.78	10.5
3	62065	8 (GC)		18.2	8.92	4.00	31.6
1	3997	4 (GC)		2.28	1.83	1.44	5.66
2	15673	4 (GC)		9.16	4.04	2.00	15.4
1	3997	2 (GC)		4.51	1.62	1.35	7.61
2	15673	2 (GC)		18.2	5.00	2.77	26.3
1	3997	1 (GC)		9.06	1.63	1.63	12.5
2	15673	1 (GC)		36.5	7.42	3.65	49.2
1	3997	4 (P3)		0.30	0.60	0.44	1.38
2	15673	4 (P3)		1.23	1.40	0.55	3.23
3	62065	4 (P3)		4.92	4.16	1.64	10.88
4	247009	4 (P3)		19.83	20.39	18.33	59.04
1	3997	2 (P3)		0.64	0.48	0.36	1.51
2	15673	2 (P3)		2.46	1.52	0.70	4.75
3	62065	2 (P3)		9.85	6.61	2.92	19.68
1	3997	1 (P3)		1.29	0.40	0.32	2.05
2	15673	1 (P3)		5.14	2.23	1.13	8.62
3	62065	1 (P3)		20.62	12.32	5.75	39.26

Tabelle 2: CPU-Zeiten für einen Zeitschritt (Simulation Wasserstofflamme) bei unterschiedlicher Netzfeinheit und Prozessoranzahl

Prozessor möglich). Demgegenüber standen nur vier Prozessoren eines Pentium III-Clusters mit einer deutlich besseren Hauptspeicherausstattung uneingeschränkt zur Verfügung.
Das Kommunikationsverhalten des GC128 ist bei Verwendung höherer Prozessoranzahlen nicht zufriedenstellend. Besonders deutlich kann dies an der mit der Prozessoranzahl wachsenden Gesamtrechenzeiten für das Beispiel mit 15673 Knoten abgelesen werden.
Das PC-Cluster bietet eine etwa achtfach höhere Rechengeschwindigkeit pro Knoten. Die verfügbare Kommunikationleistung (mit MPI über Ethernet) hält jedoch mit diesem Leistungszuwachs nicht Schritt und stellt für höhere Prozessoranzahlen ($Np \geq 8$) dann eine merkliche Beschränkung dar.
Außer hardwarebezogenen Ursachen überlagern auch numerische Effekte die dargelegten Rechenzeitrelationen. So wächst für feiner werdende Netze (Level 4 und 5) die Zahl der inneren Iterationen in den CG-Algorithmen deutlich an. Ursache hierfür ist zum einen die nicht optimale Vorkonditionierung der symmetrischen Systemmatrix im Projektionsschritt ((83), siehe auch Abschnitt 4.1.3). Auch die Lösung der unsymmetrischen Gleichungssyteme erweist sich mit fallender Ortsschrittweite als problematischer, da der zunehmende elliptische Anteil in den diskreten Systemen eine adäquate Vorkonditionierung erfordern würde. Der Einsatz der hierarchischen Vorkonditionierung für die *unsymmetrischen* Gleichungssyteme kann an dieser Stelle nicht empfohlen werden, da sie ein chaotisches Konvergenzverhalten bewirken und nicht selten sogar zur Divergenz des CGS führen (siehe [M94]). Um die Konvergenz der iterativen Löser sicherzustellen, wurde ausschließlich mit reiner Diagonalskalierung der unsymmetrischen Systeme gearbeitet.
Die Gesamtbilanz der durch Erhöhung der Prozessoranzahl erreichten Rechenzeitreduzierung fällt, bedingt durch die Summe dieser Einflüsse, relativ ernüchternd aus. Dringend geboten für die Berechnung sehr komplexer und auch räumlicher Problemstellungen mit mehreren tausend Zeitschritten erscheint eine verbesserte Rechnerplattform, bei der die Anzahl der Prozessoren, die Hauptspeicherausstattung und die Kommunikationsleistung in einem ausgewogenen Verhältnis stehen.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Strömungen mit veränderlicher Dichte, jedoch kleiner Machzahl, stellen keineswegs ein Randgebiet der Strömungsmechanik dar. Anwendungsrelevante Aufgaben, insbesondere Gasströmungen mit starken thermischen Gradienten, Strömungen von Stoffgemischen und Vorgänge mit chemischen Reaktionen gehören dieser Problemklasse an.
Trotz der formal gegebenen Zuordnung zu *kompressiblen* Strömungen ist es sinnvoll, die numerische Behandlung von Vorgängen mit kleiner Machzahl an die Verfahren für inkompressible Strömungen anzulehnen. Der wesentliche Grund besteht in dem markanten Unterschied zwischen den auftretenden Transportgeschwindigkeiten für Masse, Impuls und Energie einerseits und der Schallgeschwindigkeit andererseits.
Es werden Modelle betrachtet, die zwar die Dichte als veränderliche Größe behandeln, die Ausbreitung von Schallwellen jedoch ausfiltern. Für die Beschreibung dieses Verhaltens hat sich eine Aufspaltung des statischen Druckes in einen dominierenden nur zeitabhängigen

thermodynamischen und einen hydrodynamischen Anteil (100) in der Literatur weitgehend durchgesetzt ([MS85], [Hori92]).

$$p(x,t) = p_T(t) + p_d(x,t) \qquad \text{wobei gelte:} \qquad p_d \ll p_T \tag{100}$$

Die Berechtigung dieses vereinfachenden Ansatzes ist nicht unumstritten (siehe [GKMR96]), doch zeigen quantitative Abschätzungen der verschieden Einflußparameter, daß in bestimmten Szenarien die obige Aufspaltungshypothese adäquat ist.
Das betrachtete Modell unterscheidet sich von der inkompressiblen Strömung zunächst vor allem durch die Berücksichtigung der vollständigen Kontinuitätsgleichung, wobei die Dichte ϱ als eine temporär berechenbare Funktion behandelt wird.

$$\frac{D\varrho}{Dt} + \varrho\nabla\cdot\vec{v} = \frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\vec{v}) \quad = 0 \tag{101}$$

Bei direkter Einbeziehung der Gleichung (101) in ein Projektionsverfahren erfolgt eine Abbildung der Geschwindigkeit in eine, durch die Diskretisierung von (101) beschriebene, Mannigfaltigkeit. Es sind mehrere Varianten der Realisierung dieses Schrittes möglich, naheliegend ist jedoch die Entscheidung für einen symmetrischen Projektionsoperator sowie weitgehender Bewahrung der Eigenschaften des Verfahrens für inkompressible Medien.
Die angestellten Untersuchungen und Beispielrechnungen zeigen jedoch, daß das auf der Diskretisierung von (101) beruhende Projektionsverfahren numerische Instabilitäten aufweist, deren tiefere Ursachen offenbar in der Unstetigkeit der Approximation der in den Berechnungsprozeß eingehenden Dichtezeitableitung liegen. Die Berechnungen werden insbesondere dann beeinträchtigt, wenn sich sich steile Dichtefronten im Lösungsgebiet bewegen. Neuere Untersuchungen in der Literatur ([VTM99]) bestätigen diesen negativen Befund.
Als alternative Vorgehensweise ist die vollständige Substitution der materiellen Dichteableitung $\frac{D\varrho}{Dt}$ in (101) durch räumliche Differentialoperatoren mit Hilfe der thermischen Zustandsgleichung und den Transportgleichungen zu nennen. Eigene Untersuchungen zu dieser Problematik stehen allerdings noch aus.
In Zusammenhang mit dem betrachteten Modell für Strömungen mit niedriger Machzahl verdient die Tatsache Beachtung, daß unter bestimmten Bedingungen nahezu divergenzfreie Geschwindigkeitsfelder vorliegen (siehe Abschnitt 3). Diese Eigenschaft kann zur Konstruktion eines einfachen und stabilen numerischen Verfahrens genutzt werden (siehe Abschnitt 4.1.3). Testrechnungen unter Verwendung divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder zeigen, daß hinsichtlich des langfristigen zeitlichen Verlaufes von Simulationsrechnungen nur geringe Unterschiede zu Berechnungen mit Berücksichtigung der vollständigen Kontinuitätsgleichung festzustellen sind. Mit Einschränkungen gilt diese Aussage auch für die Simulation einer laminaren Diffusionsflamme, wo infolge der vorhandenen starken Wärmequellen die Berechtigung des Ansatzes divergenzfreier Geschwindigkeitsfelder in Frage steht.
Ein Kriterium für die Qualität der berechneten Feldgrößen stellt die integrale Massenerhaltung dar. Für Strömungen in geschlossenen Lösungsgebieten hat dies besondere Relevanz, da sich die Massendifferenz akkumulieren und im Ergebnis von Langzeitrechnungen zu

erheblichen Fehlern führen kann. Untersuchungen an einem konvektiv-diffusiven Vermischungsvorgang zeigen, daß die integrale Massenbilanz stark von der Zeitdiskretisierung und von der iterativen Lösung der gekoppelten Aufgabe im Zeitschritt abhängt.
Bei der Simulation des Langzeitverhaltens einer Wasserstofflamme bestand das Ziel, zur Verifizierung der Algorithmen die Flackerfrequenz der Flamme zu ermitteln und mit bekannten experimentellen Befunden zu vergleichen. Die durchgeführten numerischen Experimente zeigten zunächst eine starke Abhängigkeit des Langzeitverhaltens des Verbrennungsvorganges von der Größe des Lösungsgebietes Ω. In Gebieten mit zu geringer vertikaler Ausdehnung erscheinen keine periodischen Wirbelstrukturen, es entwickelt sich ein stationärer Zustand. In entsprechend vergrößerten Gebieten Ω findet eine instationäre Wirbelbildung statt, doch kommt dort es zu einem Aufstauen der Wirbelstrukturen am oberen Gebietsrand. Hierbei handelt es sich offenkundig um eine Wirkung der in der Praxis der FEM-Berechnungen üblicherweise verwendeten Austrittsrandbedingung für Strömungsvorgänge, die aus unserer Kenntnis bisher nicht bekannt war.

Im vorgelegten Bericht werden mit numerischen Algorithmen, die aus dem Bereich der inkompressiblen Strömungen verallgemeinert wurden, Simulationsrechnungen für Fluide mit stark veränderlicher Dichte, aber niedrigen Machzahlen, ausgeführt. Es zeigt sich, daß die betrachtete Aufgabenklasse hinsichtlich ihrer numerischen Modellierung eine Reihe von z.T. neuen Fragestellungen aufwirft, die weiterführende Untersuchungen anregen.
Als ein Schwerpunkt aktuell erforderlicher Weiterentwicklungen erscheint die Einbeziehung einer modifizierten Kontinuitätsbeziehung (75) in das Projektionsverfahren. Die festgestellten integralen Massendefekte geben Veranlassung, die zeitliche Approximation und die Konvergenz der nichtlinearen Iteration innerhalb eines Zeitschrittes zu verbessern.
Eine Voraussetzung für die Behandlung realitätsnaher, vor allem auch räumlicher, Modelle stellt die Anwendung adaptiver Methoden dar, die in dieser Aufgabenklasse ein anspruchsvolles Referenzobjekt vorfinden.
Eine Antwort sollte auch auf die aufgeworfene Frage nach einer geeigneten Randbedingung für ein rückwirkungsfreies Ausströmen aus dem Lösungsgebiet gefunden werden.

Literatur

[BSL60] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot
Transport phenomena
Wiley, New York, 1960.

[B98] M. Braak
An adaptive finite element method for reactive flow problems
Dissertation, Universität Heidelberg, 1998.

[BR98] M. Braak, R. Rannacher
Adaptive finite element methods for low-Mach-number flows with chemical reactions
Lecture Series 1999-03, v. Karman Institute, 1999.

[BP92] U. Bückle, M. Peric
Numerical simulation of bouyant and thermocapillary convection in a square cavity.
Numer. Heat Transfer, Part A, 21:101–121, 1992.

[BH82] A.N. Brooks, T.J.R. Hughes
Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flow with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations.
Comp. Meths. Appl. Mech Engng., 32, 199-259, 1982

[ChP86] D.R. Chenoweth, S. Paolucci
Natural convection in an enclosed vertical air layer with large horizontal temperatur differences
J. Fluid Mech., 169:173-210, 1986.

[CM93] Y. Choi, C. Merkle
The application of precoditioning in viscous flow
J. Comput. Physics 105:207–223, 1993.

[CVZ98] R. Codina, M. Vazquez, O. C. Zienkiewicz
A general algorithm for compressible and incompressible flows.
Part III: The semi-implicit form
Int. J. Num. Meths. in Fluids, 27:13–32, 1998.

[DDC96] G. Duffa, C. Desmeuzes, J. Couzi
Chemical Non-equilibrium Flows: Precision of Calculations with Emphasis on Diffusion Approximation
in: J.A. Desideri, ... (Ed.): *Experimentation, Modelling and Computation in Flow, Turbulence and Combustion*, Volume 1, J.Wiley, 1996

[LG96] C.H. Li, R. Glowinski
Modelling and numerical simulation of Low-Mach-number compressible flows
Int J. Num. Meths. in Fluids, 23:77–103, 1996.

[GKMR96] K.J. Geratz, R. Klein, C.D. Munz, S. Roller
Multiple Pressure Variable (MPV) approach for low Mach number flows based on asymptotic analysis
Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 52, Vieweg 1996.

[GWKKS96] R. Grabski,F. Wienecke,M. Kutz,K.-J. Kohl,H. Starke
Temperaturen in Gasflammen bei Experimenten unter Mikrogravitation einschließlich Rechnersimulation
Institutsbericht Nr.349, Institut der Feuerwehr Sachsen-Anhalt, Heyrothsberge 1996

[GC90] P.M. Gresho, S.T. Chan
On the theory of semi–implicit projection methods ..., part I,II.
Int. J. Num. Meths. Fluids, 11:587–659, 1990.

[GCLU84] P.M. Gresho, S.T. Chan, R.L. Lee, C.D. Upson
A modified finite element method for solving the time-dependent incompressible Navier-Stokes equations. part I: Theory
Int. J. Num. Meths. Fluids, 4:557–598, 1984.

[GIMM94] U. Groh, C. Israel, S. Meinel, A. Meyer
On the Numerical Simulation of Coupled Transient Problems on MIMD Parallel Systems. Preprint SPC 94_5, Techn. Univ. Chemnitz 1994.

[GMM94] U. Groh, S. Meinel, A. Meyer
On the Numerical Simulation of Coupled Transient Problems on MIMD Parallel Systems.
In: W. Hackbusch, G. Wittum (Hrsg.), Fast Solvers for Flow Problems, Proceedings of the Tenth GAMM–Seminar Kiel, January 14–16, 1994, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 49, 109-120, Vieweg 1995.

[HHMP94] G. Haase, T. Hommel, A. Meyer, M. Pester
Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen.
Preprint SPC 94_4, Techn. Univ. Chemnitz 1994.

[HLM92] G. Haase, U. Langer, A. Meyer
Parallelisierung und Vorkonditionierung des CG – Verfahrens durch Gebietszerlegung.
In: G. Bader, R. Rannacher, G. Wittum (Hrsg.); Numerische Algorithmen auf Transputersystemen, Teubner-Skripten zur Numerik, Stuttgart 1993.

[HCB54] J.O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, R. B. Bird
Molecular Theory of Gases and Liquids
Wiley, New York 1954.

[Hori92] Y. Horibata
Numerical solution of a Low-Mach-number flow with a large temperatur variation
Computers Fluids, Vol.21, No.2: 185–200, 1992

[Jo92] C. Johnson
Finite element methods for flow problems
AGARD Report 787, 1992.

[KGM94] V.R. Katta, L.G. Goss, W.M. Roquemore
Numerical Investigations of Transitional H_2/N_2 Jet Diffusion Flames
AIAA Journal, Vol. 32, No. 1:84–94, 1994.

[MS85] A. Majda, J. Sethian
The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion
Combust. Sci. and Tech., Vol.42:185–205, 1985.

[M94] S. Meinel
Zum Konvergenzverhalten vorkonditionierter CG–Verfahren bei der Lösung von Gleichungssystemen aus der Strömungssimulation.
Workshop über „Parallele Lösung großer Gleichungssysteme“, Chemnitz, 27.–28.05.1994.

[MM93] S. Meinel, A. Meyer
Grundlagen eines Strömungssimulationsprogramms für MIMD–Parallelrechner.
Unveröff. Forschungsbericht, TU Chemnitz–Zwickau, 1993.

[MP97] S. Meinel, M. Pester
Examples for animated solutions of flow simulations.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls.html`

[Mey98] A. Meyer
Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD–Parallelrechnern.
Zwischenbericht zum DFG-Sonderforschungsbereich 393, Teilprojekt D3, TU Chemnitz, 1998.

[MMIKG93] A. Meyer, S. Meinel, C. Israel, K.-J. Kohl, R. Grabski
Numerical Simulation of Fire Spread on a MIMD Parallel Computer.
Fifth Int. Conf. on Numerical Combustion, Garmisch–Partenkirchen, 29.9.–1.10.1993.

[NSIT98] N. Nigro, M. Storti, S. Idelsohn, T. Tezduyar
Physics based GMRES precoditioner for compressible and incompressible Navier-Stokes equations
Comput. Methods Appl. Mech. Engng. 154:203–208, 1998.

[PHBCCFJ98] R.B. Penber, L.H. Howell, J.B. Bell, P. Colella, W.Y. Crutchfield, W.A. Fifeland, J.P. Jessee
An adaptive projection method for unstaedy, low-Mach number combustion
Combust. Sci. and Tech., Vol. 140:123–168, 1998

[P82] S. Paolucci
On the filtering of sound from the Navier Stokes equations
Sandia National Laboratories, Rep. SAND82-8257

[Pa84] R.L. Panton
Incompressible flow
John Wiley & Sons, 1984.

[SWWAD93] J.M. Straka, R.B. Wilhelmson, L.J. Anderson, K.K. Drögemeier
Numerical solution of a non-linear density current: A benchmark solution and comparisons
Int J. Num. Meths. in Fluids, 17:1–22, 1993.

[TLGBG92] T.E. Tezduyar, J. Liou, D.G. Ganjoo, M. Behr, R. Glowinski
Unsteady incompressible flow computations with the Finite Element method
In: T.J. Chung (Ed.), Finite Elements in Fluids, Vol.8, Hemisphere Publ. Corp., 1992.

[TM93] I. Tiselj, B. Mavko
Hydrogen combustion descriped with incompressible-fluid approximation
ZAMM, 73:T619–T623, 1993

[Tur96] St. Turek
A comparative study of time stepping techniques for the incompressible Navier-Stokes equations: From fully implicit non-linear schemes to semi-implicit projection methods
Int J. Num. Meths. in Fluids, 22:987–1011, 1996.

[Tur97] St. Turek
On discrete projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations: an algorithmical approach
Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 143:271-288, 1997

[T87] E. Turkel
Preconditioned methods for solving the incompressible and low speed compressible equations
J. Comput. Physics, 72:277– , 1987.

[VTM99] B. Van't Hof, J.H.M. Ten Thije Boonkkamp, R.M.M. Matthej
Pressure Correction for laminar combustion
Combust. Sci. and Tech., Vol. 149, 201–223, 1999.

[W85] F. A. Williams
Combustion theory
Addison Wesley Publ. Comp., 1985

[WM93] J. Warnatz, U. Maas
Technische Verbrennung
Springer- Verlag, 1993

[YJLW95] S. Yu, B. Jiang, N. Liu, J. Wu
The least-squares finite element method for low-mach-number compressible flows
Int. J. Num. Meths. Engng., 38:3591–3610, 1995

[ZC95] O. C. Zienkiewicz, R. Codina
A general algorithm for compressible and incompressible flows. Part I: The split characteristic-based scheme
Int. J. Num. Meths. in Fluids, 20:869–885, 1995.