

Kritische numerische Aspekte bei der Anwendung von Feldmodellen

Matthias Münch

Scientific Computing

Fachbereich Mathematik & Informatik

Freie Universität Berlin

Vortrag zur
55. vfdb-Jahresfachtagung
21. bis 25. Mai 2006 in Salzburg

muench@math.fu-berlin.de

1 Einleitung

Der Einsatz und die Diskussion über die Möglichkeiten von Brandsimulationsprogrammen zur Untersuchung brandschutztechnischer Fragestellungen hat in den letzten Jahren auch im deutschsprachigen Raum zugenommen. Während die in Brandschutzfachkreisen bereits länger etablierten Zonenmodelle gezielt für die Beantwortung spezieller Fragestellungen des Brandschutzes entwickelt wurden, richtet sich das Interesse verstärkt auf die sogenannten, vom Konzept her allgemeiner anwendbaren Feldmodelle.

Derartige Modellansätze sind in den Ingenieurwissenschaften unter dem Oberbegriff *Computational Fluid Dynamics* (CFD) bekannt. Während sich diese Techniken und das erforderliche Hintergrundwissen in zahlreichen Anwendungsbereichen der numerischen Strömungsmechanik (bspw. der Luft- und Raumfahrt, der Wetter- und Klimavorhersage, ...) bereits länger etabliert haben, erlaubt erst die Verfügbarkeit preiswerter Rechenleistung zunehmend auch den Einsatz bei der Klärung brandschutzrelevanter Fragestellungen. Wesentliche Ursache für den hohen Bedarf an Rechenleistung ist, dass im Gegensatz zu den vornehmlich in Brandschutzfachkreisen etablierten Zonenmodellen die Feldmodelle den kompletten Satz der gekoppelten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie mit einer um viele Größenordnungen höheren Raumauflösung berechnen als die Zonenmodelle.

Aufgrund dieser zeitlich versetzten Entwicklung ist das Wissen um die Grenzen und Möglichkeiten der CFD-Techniken im Bereich des Brandschutzes noch relativ begrenzt, bzw. nur einigen Experten auch im Detail bekannt. Mittlerweile stehen dem interessierten Anwender jedoch zahlreiche Brandsimulationsprogramme mit den unterschiedlichsten Modellansätzen zur Verfügung, im Fall des Programms *Fire Dynamic Simulator* [2, 15, 16] sogar kostenlos. Mit dem Kapitel 5 im Entwurf des vfdb-Leitfadens „Ingenieurmethoden des Brandschutzes“ [8] hat das vfdb-Referat 4 diese Problematik aufgegriffen und stellt eine erste Orientierungshilfe zur Verfügung.

1.1 Problembeschreibung

Sowohl im Leitfaden, als auch in zahlreichen Vorträgen und Publikationen wird betont, dass aussagefähige und belastbare Ergebnisse nicht nur von gut validierten Programmen, sondern im hohen Maße auch

von den Kenntnissen des Anwenders abhängen. Dies gilt nicht nur für ein grundlegendes Verständnis der physikalisch-chemischen Brandvorgänge, oder die richtige Auswahl der Eingangsdaten und Brandszenarien, sondern auch für eine vertiefte Kenntnis der eingesetzten Modellierungsverfahren. Letztlich basieren alle Brandsimulationsmodelle auf mathematischen bzw. numerischen Techniken, mit denen die mit Hilfe physikalischer Annahmen aufgestellten gekoppelten nichtlinearen Differentialgleichungssysteme gelöst werden. Auf dem Weg von der mathematischen Differentialgleichung zur vom Computer zu bearbeitenden Programmzeile sind hierbei weitere Approximationen notwendig, die die Anwendbarkeit des Programms einschränken können.

Die Entstehung eines Programms lässt sich in die drei Entwicklungsstufen Modellbildung, Diskretisierung und Programmierung unterteilen, die als Ergebnis ein Modellproblem, ein Verfahren und ein Programm liefern. Die Begriffe sind nachfolgend erläutert:

Modellproblem

Hierunter wird die abstrakte Abbildung der Realität durch mathematische Gleichungen, inklusive Anfangs- und Randbedingungen verstanden. Im Modellbegriff sind alle Vereinfachungen hinsichtlich der Abbildung der Naturgesetze enthalten, bspw. ein verringerter Detaillierungsgrad bei der Abbildung eines physikalischen Prozesses.

Verfahren

Das Verfahren beschreibt die Konstruktionsvorschrift zur Abbildung des Modellproblems auf einem Computer. Die derzeit verfügbaren Computer (Digitalrechner) können keine kontinuierlichen sondern nur diskrete Zustände darstellen. Daher müssen die zu lösenden Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen umgewandelt, d.h. diskretisiert werden. Ferner beinhaltet die Konstruktionsvorschrift auch die Art und Weise, wie die derart aufgestellten algebraischen Gleichungen numerisch zu lösen sind. Das Verfahren beinhaltet somit Vereinfachungen und Annahmen hinsichtlich der numerischen Konstruktion.

Programm

Das Programm ist die mit einer Programmiersprache umgesetzte Konstruktionsvorschrift (Software). Hierbei kann es durch unterschiedliche Programmieransätze, sowie aufgrund der eingesetzten Rechnerarchitektur zu weiteren Einschränkungen kommen.

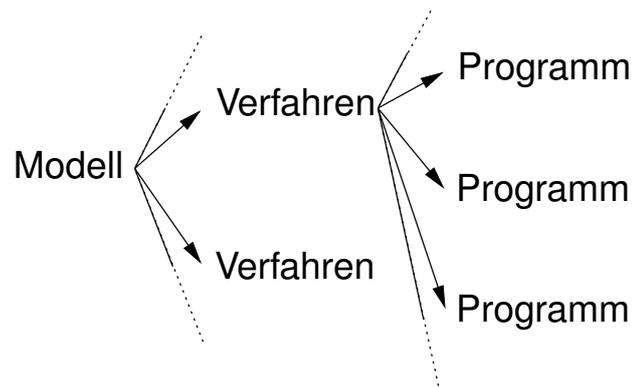


Abbildung 1: Entwicklungsstufen eines Programms

Die Abbildung (1) zeigt, dass mit den Variationsmöglichkeiten in jeder Entwicklungsebene aus dem gleichen Modellproblem unterschiedliche Programme entstehen können¹. Hierbei wird durch die eingeführten Approximationen und Näherungen der Anwendungsbereich des Programmes beschränkt oder besondere Anforderungen an die vom Benutzer vorzugebenden Anfangs- und Randbedingungen gestellt.

Im Gegensatz zur idealisierten Darstellung in Abbildung (1) basieren die verfügbaren Brandsimulationsprogramme in der Regel nicht auf dem gleichen Modellproblem. Vielmehr bieten sie dem Anwender häufig in einer Art Baukastensystem unterschiedliche Modellproblem-Verfahrenskombinationen für einzelne Teilprozesse zur Auswahl an. Dies führt gerade für die Betrachtung auftriebsgetriebener, thermisch expandierender Strömungen zu einer Vielzahl von Kombinationsmöglichkeiten. Gründe hierfür sind u.a.

- die Vielzahl der physikalischen Teilprozesse (z.B. Wärmestrahlung, Gravitation, Wärmeleitung, Diffusion, Verbrennung, ...), die während eines Brandes in Wechselwirkung stehen.
- dass trotz der Fortschritte bei der Rechenkapazität der Hardware und der Effizienz der numerischen Verfahren nicht jeder dieser Teilprozesse mit höchstmöglicher Präzision darstellbar ist.
- dass für die Wiedergabe einiger Phänomene keine vollständige und abgeschlossene Theorie verfügbar ist. So gibt es bspw. keine abgeschlossene analytische Theorie oder einen allgemein gültigen Ansatz für die numerische Darstellung der Turbulenz. Auch

¹Dies kann auch unbeabsichtigt durch Fehler passieren.

die Modellierung von Verbrennungsvorgängen ist noch Gegenstand aktueller Forschungsvorhaben [31, 32, 33].

- dass die Zeit- und Ortsskalen der aufzulösenden Phänomene teilweise um mehrere Größenordnungen auseinanderliegen. Z.B. verlangt die Auflösung einer Flammenzone Gitterweiten kleiner als 1 mm. Mit den heute verfügbaren massiv-parallelen Supercomputern begrenzt sich das Rechengebiet für vollaufgelöste turbulente Verbrennungsrechnungen hoher Reynolds-Zahlen auf ein Volumen, welches etwa einem Würfel von 10 bis 20 mm Kantenlänge entspricht [20]. Die für die Größe des Strömungsgebietes verantwortlichen Gebäudeabmessungen liegen jedoch in der Größenordnung von mehreren Metern.
- dass die Vielzahl der möglichen Geometrien und Randbedingungen möglichst allgemeine Ansätze erfordert, bzw. die bei der Verfahrenskonstruktion eingeführten Annahmen, deren Anwendungsbereich schnell sehr stark eingrenzen können.

Die Aufstellung eines Modellproblems, respektive einer geeigneten Kombination von Modell-Verfahrensbausteinen zur effizienten Beschreibung eines Brandes, gehört somit zu den anspruchsvolleren Aufgaben. Obwohl die allen Modellproblemen zugrunde liegenden Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie eine allgemeine Beschreibung aller physikalischer Phänomene auf einer Vielzahl von Längen- und Zeitskalen liefern, lässt sich aus Gründen beschränkter Rechenkapazität nur ein Skalenabschnitt betrachten. Die übrigen Skalenbereiche müssen entweder geeignet approximiert oder vernachlässigt werden.

Nur mit Kenntnis des zu untersuchenden Problems kann die Eignung der im Programm implementierten Approximationen und Näherungen bewertet werden. Es liegt somit in der Verantwortung des Anwenders, das für seinen Problemfall geeignete Programm auszuwählen, bzw. innerhalb dieses Programms eine geeignete Auswahl der verfügbaren Module festzulegen. Hierfür sind jedoch Detailinformationen über die Modellbildung und Verfahrenskonstruktion zwingend notwendig.

Nach einer kurzen Vorstellung der Modellgrundlagen für inkompressible Strömungen, werden diese anhand des gut dokumentierten und frei zugänglichen Programms „Fire Dynamic Simulator“ diskutiert. Nachfolgend wird an einigen numerischen Grundlagen der Einfluss des Anwenders auf die numerische Rechnung thematisiert. Soweit möglich, sind die Erläuterungen allgemein gehalten.

2 Grundlagen der Strömungsberechnung

Grundlage der Berechnung auftriebsgetriebener, thermisch expandierender Strömungen ist das eingesetzte Verfahren zur Strömungsberechnung, welches z.B. den Transport von Rauch und Wärme durch Advektion beschreiben soll. Das folgende Kapitel gibt eine kurze Einführung über eine Reihe wichtiger Aspekte, die in einem effizienten Modell- und Verfahrensansatz berücksichtigt werden müssen.

2.1 Erhaltungsgleichungen

Basis der Beschreibung einer Strömung sind die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Hierbei repräsentiert ρ die Dichte, \vec{v} den Geschwindigkeitsvektor, p den Druck, ρe die Energiedichte, t die Zeit, V das betrachtete Volumen, A die Volumenoberfläche, \vec{n} den Normalenvektor auf die Volumenoberfläche, sowie S_ρ , $S_{\rho\vec{v}}$ und $S_{\rho e}$ die Quellterme der auf das Volumen einwirkenden Einflüsse wie bspw. Reibung, Strahlung, Verbrennungsprozesse

Massenbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \int_V S_\rho dV$$

Impulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p \vec{n} dA = \int_V S_{\rho\vec{v}} dV \quad (1)$$

Energiebilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \int_V S_{\rho e} dV.$$

Hinzu kommt die **Definition der Energiedichte**, die sich für ein ideales Gas mit konstanten spezifischen Wärmekapazitäten auf

$$\rho e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v} \quad (2)$$

reduziert. γ ist der Isentropenexponenten. Die Gleichungen (1) und (2) stellen ein System gekoppelter, nichtlinearer Differentialgleichungen dar, die sich nur mit numerischen Methoden lösen lassen. Im Rah-

men der bei ihrer Herleitung verwendeten Annahmen² sind sie all-gemeingütig und berücksichtigen auch physikalische und chemische Prozesse, die für die Untersuchung von Rauch- und Wärmeausbrei-tungsvorgängen in Gebäuden weniger von Interesse sind.

Aufgrund der begrenzt verfügbaren Rechenkapazitäten ist es wün-schenswert, die Rechenleistung auf die als wichtig eingeschätzten Pro-zesse zu fokussieren. Alle anderen Prozesse können dann mit gerin-gerem Rechenaufwand berücksichtigt oder ganz vernachlässigt wer-den. Derartige Überlegungen sind nicht brandschutzspezifisch, son-dern werden im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens (Scientific Computing) seit vielen Jahrzehnten in zahlreichen Forschungsgebieten vorangetrieben, z.B. [4, 6, 31, 32].

Um die für ein grundlegendes Verständnis der Modellierung auftriebs-getriebener, thermisch expandierender Strömungen notwendigen Zu-sammenhänge darzustellen, genügt die Betrachtung einer reibungs-freien Strömung (Eulergleichungen), d.h. alle Quellterme der rechten Seite von (1) werden zu Null angenommen. Gleichwohl gelten die er-läuterten Zusammenhänge ganz allgemein.

2.2 Analyse der Erhaltungsgleichungen

Die Analyse erfolgt mit dem Ziel, die verfügbare Rechenkapazität auf die interessierenden strömungsmechanischen Phänomene zu fokus-sieren. Die betrachteten Eulergleichungen werden normiert und dimen-sionslos gemacht. Dies geschieht, indem jede dimensionsbehaftete Größe ϕ^* durch das Produkt der dimensionslosen Größe ϕ mit ihrem Referenzwert ϕ_{ref} ersetzt wird

$$\phi^* = \phi \cdot \phi_{ref}. \quad (3)$$

Als Referenzgrößen werden ρ_{ref} , v_{ref} , p_{ref} , die Referenzlänge l_{ref} sowie $e_{ref} = \frac{p_{ref}}{\rho_{ref}}$, $t_{ref} = \frac{l_{ref}}{v_{ref}}$ und die Schallgeschwindigkeit $c_{ref} = \sqrt{\frac{p_{ref}}{\rho_{ref}}}$ verwendet.

Bei geeigneter Umformung ergeben sich aus den Referenzgrößen dimensionslose Kennzahlen, die als systemeigene Maßstäbe eine an-schauliche Interpretationsmöglichkeit des Systemverhaltens liefern. Im vorliegenden Beispiel ist dies die Mach-Zahl

²Übliche Annahmen bei der Herleitung sind u.a. Kontinuumsannahme, ideales Gasverhalten, New-ton'sches Fluidverhalten, konstante Wärmekapazitäten ...

$$M = \frac{v_{ref}}{c_{ref}} = \sqrt{v_{ref}^2 \frac{\rho_{ref}}{p_{ref}}} \hat{=} \frac{\text{Strömungsgeschwindigkeit}}{\text{Schallgeschwindigkeit}}. \quad (4)$$

Sie kennzeichnet den Einfluss der Kompressibilität. Charakteristische Grenzwerte sind $M = 0$ für eine inkompressible Strömung, sowie $M = 1$ für eine voll-kompressible Strömung³. Nach der Entdimensionierung lauten die Eulergleichungen für ein beliebiges Kontrollvolumen V

Massenbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0$$

Impulsbilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A \frac{p}{M^2} \vec{n} dA = 0 \quad (5)$$

Energiebilanz

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p] \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0,$$

sowie die **Definition der Energiedichte**

$$\rho e = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{M^2}{2} \rho \vec{v} \cdot \vec{v}. \quad (6)$$

Bei einem Vergleich der entdimensionierten (5) mit den noch dimensionsbehafteten Eulergleichungen (1) fällt auf, dass sowohl der Druckterm in der Impulsbilanz, als auch der kinetische Anteil in der Definition der Energiedichte einen Vorfaktor in Form der Mach-Zahl M^{-2} bzw. M^2 erhalten hat. Durch die Normierung und Entdimensionierung ist als systemeigener Maßstabsfaktor die Mach-Zahl M hervorgetreten, die die normierten Terme gegeneinander ins Verhältnis setzt.

Für kleiner werdende Mach-Zahlen wird der Druck offenbar zunehmend unabhängig von der kinetischen Energie der Strömung und der Druckterm in der Impulsbilanz für den Grenzfall $M \mapsto 0$ singulär. Dies hat erhebliche Auswirkungen auf die mathematische Struktur und das Lösungsverhalten dieses Gleichungssystems⁴.

³Eine umfangreichere Beschreibung der Vorteile und Methodik der Dimensionsanalyse findet sich in Standardlehrbüchern oder auch in [18, 27].

⁴Für $M = 1$ besitzt das Gleichungssystem einen hyperbolischen, für den hier zu untersuchenden Grenzübergang $M = 0$ jedoch einen gemischt hyperbolisch-elliptischen Charakter. Dies erfordert andere mathematische Lösungsstrategien. Informationen hierzu finden sich bspw. in [19, 34, 35].

Eine Abschätzung der Referenzgrößen typischer im Brandfall auftretender Strömungen durch $v_{ref} = 1\text{ m/s}$, $c_{ref} = 330\text{ m/s}$ liefert Mach-Zahlen in der Größenordnung von $M \approx 0.003^5$. Somit liegt zumindest ein wesentlicher Teil der betrachteten Strömungen im Grenzbereich verschwindender Mach-Zahl.

Offensichtlich verursacht die Berücksichtigung der im Vergleich zur Advektion um ein Vielfaches schnelleren Schallwellen erhebliche Restriktionen. An der Betrachtung von Schallwellen besteht bei der Untersuchung von Rauchgasströmungen in der Regel jedoch gar kein Interesse. Es zeigt sich auch, dass sie für die Strömungsentwicklung unerheblich sind. Vielmehr steht die Betrachtung der advektiven Strömungsgeschwindigkeit \vec{v} im Vordergrund. Diese Problemstellung tangiert viele praktische Anwendungen, weshalb es zahlreiche Forschungsanstrebungen gibt, möglichst effiziente Verfahrensansätze für Strömungen kleiner Mach-Zahl zu entwickeln [3, 12, 21, 25].

Das Systemverhalten thermisch-getriebener Auftriebsströmungen in Abhängigkeit eines Energiequellterms wurde 1978 durch *Rehm und Baum* [22] untersucht. Wenig später erfolgte durch *Klainerman et al.* [9] und *Schochet* [28] eine mathematische Untersuchung der Euler-Gleichungen für den Grenzfall $M \mapsto 0$. Die Arbeiten kommen übereinstimmend zu dem Ergebnis, dass der Druck p in einen thermodynamischen Umgebungsdruck p_0 , sowie einen hydrodynamischen Druck p_2 aufgespalten werden muss, die getrennt zu behandeln sind.

Klein et al. [10, 12] zeigte mit Hilfe einer asymptotischen Mehrskalanalyse, dass bei hinreichend großen Strömungsgebieten zusätzlich noch ein akustischer Druck p_1 auftritt und drei statt zwei charakteristische Strömungsregime anhand der Mach-Zahl zu unterscheiden sind. Dies sind für

$M = 1$: das kompressible Regime mit dem Gesamtdruck p ,

$0 < M \ll 1$: das schwachkompressible „Low-Mach“-Regime mit der Zerlegung $p = p_0 + Mp_1 + M^2p_2$,

$M \mapsto 0$: das inkompressible „Zero-Mach“-Regime mit dem Zerlegungsansatz $p = p_0 + M^2p_2$.

Die Analyse von *Klein* wurde von *Meister* [17] mathematisch überprüft und bildet die Grundlage der weiteren Erläuterungen.

⁵ v_{ref} repräsentiert das gesamte Strömungsgebiet. Dies schließt nicht aus, dass lokal deutlich größere oder kleinere Geschwindigkeiten auftreten.

2.2.1 Ergebnis der asymptotischen Analyse für $M \mapsto 0$

Die asymptotische Analyse zielt auf eine Umgehung der Restriktionen, die durch eine explizite Darstellung der Schallwellen entstehen würden. Sie ergibt, dass der Druck p in einen thermodynamischen Umgebungsdruck p_0 , sowie einen hydrodynamischen Druck p_2 aufgespalten werden kann, die unterschiedlich auf das Gleichungssystem wirken

$$p = p_0 + M^2 p_2. \quad (7)$$

Ferner liefert die Asymptotik eine Bedingung für den Druck p_0

$$\oint_A p_0 \vec{n} dA = 0. \quad (8)$$

Sie verlangt, dass im „Zero-Mach“-Regime der thermodynamische Druck ortsunabhängig ist.

Wird die Druckzerlegung (7) in die dimensionslosen Eulergleichungen (5) eingesetzt, ergibt sich für den Grenzübergang $M = 0$ ein für dieses Strömungsregime angepasstes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \oint_A \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0 \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho \vec{v} dV + \oint_A (\rho \vec{v} \circ \vec{v}) \cdot \vec{n} dA + \oint_A p_2 \vec{n} dA &= \vec{0} \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho e dV + \oint_A [\rho e + p_0] \vec{v} \cdot \vec{n} dA &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Während die Massenbilanz im Vergleich mit (5) unverändert bleibt, ändern sich sowohl Impuls- und Energiebilanz, als auch die Definition der Energiedichte

$$\rho e = \frac{p_0}{\gamma - 1}. \quad (10)$$

Das Gleichungssystem (9),(10) repräsentiert nunmehr die allgemeinen Erhaltungsgleichungen für Strömungen im Grenzfall $M \mapsto 0$. Der Einfluss der Schallwellen ist herausgefiltert. In der Impulsbilanz wirkt nur noch der hydrodynamische Druck p_2 . Dieser besitzt jedoch keinen

Einfluss auf die Energiedichte, die nur noch durch den thermodynamischen Druck p_0 beeinflusst wird. Damit sind Impuls- und Energiebilanz entkoppelt.

2.2.2 Schlussfolgerungen und Konsequenzen

Ganz offensichtlich verändert sich das Gleichungssystem für die Betrachtung von Strömungen im „Zero-Mach“-Regime. Welche Schlussfolgerungen und Konsequenzen ergeben sich nun aus den Ergebnissen der asymptotischen Analyse? Was bedeutet dies im Zusammenhang mit der Simulation der Rauch- und Wärmeausbreitung in Gebäuden?

Interpretation der Druckzerlegung

Die asymptotische Analyse zeigt, dass sich der Druck p im „Zero-Mach“-Regime in zwei Bestandteile mit unterschiedlicher physikalischer Bedeutung aufspaltet, die auf unterschiedlichen Raumskalen wirken

$$p(\vec{x}, t) = p_0(t) + M^2 p_2(\vec{x}, t). \quad (11)$$

Hierbei hat die Mach-Zahl M die Funktion des Maßstabsfaktors.

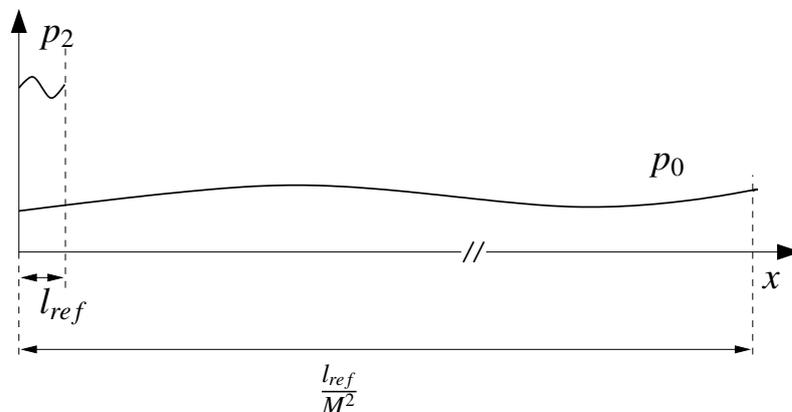


Abbildung 2: Druckskalen des „Zero-Mach“-Regimes

p_0 : Aufgrund von (8) ist der Druck p_0 nur eine Funktion der Zeit t . Schwankungen dieses Drucks sind nur oberhalb der thermodynamischen Skala $l_{ref}M^{-2}$ feststellbar (vergl. Abb. 2). Für das schon zitierte Beispiel mit $M^{-2} \approx 0.003$ bedeutet dies, dass für $l_{ref} = 0.1 \text{ m}$ der Druck p_2 Druckschwankungen im Zentimeterbereich auflöst. Hingegen kann der Druck p_0 Druckschwankungen erst im Bereich von mehreren Kilometern berücksichtigen.

Bezogen auf die Referenzlänge l_{ref} , respektive die betrachteten Gebäudeabmessungen, repräsentiert p_0 den ortsunabhängigen atmosphärischen Umgebungsdruck. Für die betrachteten Gebäudeströmungen bedeutet dies, dass dieser Druck konstant ist. Es sei denn, das zu untersuchende Strömungsgebiet befindet sich in einem gegenüber der Umgebung abgedichteten Raum (vergl. auch Erläuterungen zu (13)).

p_2 : Der hydrodynamische Druck p_2 variiert auf der Referenzlänge l_{ref} . Dies ist die kleinste Skala, auf der Entropie- bzw. Temperaturfluktuationen und Wirbelstrukturen aufgelöst werden können.

Mathematisch kommt ihm die Bedeutung zu, die Einhaltung der aus der Energiebilanz hergeleiteten Divergenzbedingung (13) in der Impulsbilanz zu gewährleisten. Physikalisch repräsentiert p_2 die Druckschwankungen, die bspw. durch Verengungen des Strömungsquerschnittes bei der Durchströmung von Türen, Fenstern, o.ä. entstehen.

Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld

Wird in der Energiebilanz (9) die Energiedichte durch (10) ersetzt, entsteht eine Gleichung für den Druck p_0 . In diesem Zusammenhang soll auch der bisher zu Null gesetzte Energiequellterm der Energiebilanz durch eine Volumenwärmequelle Q ersetzt werden⁶

$$\frac{d}{dt} \int_V \frac{p_0}{\gamma-1} dV + \oint_A \frac{\gamma p_0}{\gamma-1} \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \int_V Q dV. \quad (12)$$

Aufgrund der Druckbedingung (8) ist der Druck p_0 räumlich konstant. Für konstante Isentropenexponenten γ liefert obige Gleichung eine Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld⁷, die durch den thermodynamischen Druck p_0 , sowie die Volumenwärmequelle bestimmt wird

$$\oint_A \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \frac{\gamma-1}{\gamma p_0} \int_V Q dV - \frac{|V|}{\gamma p_0} \frac{dp_0}{dt} \quad \text{mit } \gamma = \text{const.} \quad (13)$$

Die Auswertung von (13) liefert einige sehr interessante Informationen zum Verständnis der Vorgänge im „Zero-Mach“-Regime. Die Integration über alle Geschwindigkeiten normal zur Volumenoberfläche A

⁶Für Detailinformationen im Zusammenhang mit der Modellierung von Verbrennungsreaktionen für $M \ll 1$ wird auf [11, 14, 24] verwiesen.

⁷Eine nähere Erklärung dieses Begriffes findet sich im Anhang 5.1.

steht offenbar in direkter Abhängigkeit zur zugeführten Wärmeenergie bzw. einer Druckänderung von p_0 . Dies soll an folgenden Beispielen erläutert werden:

- Gegenüber der Umgebung abgedichteter Raum
Kann über die Gebietsberandung kein Strömungsaustausch stattfinden, ist die linke Seite von (13) Null. Dann wird die zugeführte Wärmeenergie direkt in einen Druckanstieg des thermodynamischen Druckes p_0 umgesetzt

$$\frac{|V|}{\gamma p_0} \frac{dp_0}{dt} = \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \int_V Q dV \quad \text{mit } \gamma = \text{const.}$$

- Strömung ohne Wärmezufuhr und $p_0 = \text{const.}$
In diesem Fall wird die Divergenzbedingung direkt über die zeitliche Änderung des Druckes p_0 beeinflusst. Ist der Druck p_0 zeitlich konstant, gilt für die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes

$$\oint_A \vec{v} \cdot \vec{n} dA = 0.$$

- Strömung mit Wärmezufuhr und $p_0 = \text{const.}$
Nunmehr bestimmt sich die Divergenzbedingung des Geschwindigkeitsfeldes allein aus der zugeführten Wärmeenergie

$$\oint_A \vec{v} \cdot \vec{n} dA = \frac{\gamma - 1}{\gamma p_0} \int_V Q dV \quad \text{mit } \gamma = \text{const.}$$

(13) gilt sowohl für lokale Kontrollvolumen, als auch für das gesamte Strömungsgebiet. Damit definiert (13) Vorgaben, die bei der Festlegung von Anfangs- und Randbedingungen durch den Anwender zu beachten sind.

Abschließend noch einmal der Hinweis, dass bei der Formulierung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie die Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld inkompressibler Strömungen variabler Dichte aus der Energiebilanz resultiert. Die in der Literatur häufig angeführte Divergenzbedingung aus der Massenbilanz tritt hier noch gar nicht auf. Sie entsteht erst für inkompressible Strömungen konstanter Dichte. Gerade die Dichteunterschiede sind jedoch für

die auftriebsbehafteten Strömungen ursächlich. Die Anwendung eines für inkompressible Strömungen konstanter Dichte konstruierten Verfahrens auf Strömungen variabler Dichte ist daher stets mit weitergehenden Annahmen verbunden. Die Zulässigkeit dieser Annahmen ist für den konkreten Anwendungsfall vom Anwender zu überprüfen.

Anforderung an Verfahrenskonstruktionen

Die besondere Erkenntnis dieser Druckaufspaltung ist die Tatsache, dass beide Drücke die Lösung des Gleichungssystems gleichermaßen stark beeinflussen. Der räumlich homogene Druck p_0 bestimmt die Divergenzbedingung (13) aber nicht die Impulsbilanz, während der energetisch vernachlässigende hydrodynamische Druck $M^2 p_2$ der einzige in der Impulsbilanz auftretende Druck ist. Mit (9) steht damit ein Modellansatz zur Verfügung, der wie gewünscht die zur Verfügung stehende Rechenkapazität nicht für die detaillierte Berechnung von Schallwellen verwendet, sondern auf die Beschreibung des advektiven Transports von Rauch, Wärme und Impuls fokussiert.

Lösungsverfahren, die das Gleichungssystem (1) numerisch lösen ohne diese Besonderheiten zu beachten, müssen zwangsläufig scheitern, wenn sie in den Bereich $M \ll 1$ kommen [11].

2.3 Beispiel: Fire Dynamic Simulator

Auf Grundlage der Informationen zum Programmpaket FDS [15] werden die Auswirkungen der bei der Modellbildung aufgestellten Anforderungen erläutert.

Das FDS-Modell basiert auf den dimensionsbehafteten Erhaltungsgleichungen in nicht-konservativer Formulierung. Hierbei ist ρ die Dichte, \vec{v} der Geschwindigkeitsvektor, h die Enthalpie und p der Druck. Mit Ausnahme der Gravitation werden in diesem Artikel alle weiteren im FDS-Modell berücksichtigten physikalischen Einflüsse (z.B. Reibung, Strahlung, ...) in Quelltermen \mathcal{S} zusammengefasst. Die Darstellung erfolgt in differentieller Form ohne die Speziesbilanz.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) &= 0 \\
 \rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \right) + \nabla p &= \rho \vec{g} + \mathcal{S}_{\rho \vec{v}} \\
 \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \vec{v}) &= \mathcal{S}_{pe}
 \end{aligned} \tag{14}$$

Auf der Grundlage in der von *Rehm* und *Baum* in [22] veröffentlichten Asymptotik für Strömungen kleiner Mach-Zahlen wird dieses Gleichungssystem mit dem Druck-Zerlegungsansatz (15) derart modifiziert, dass die akustische Signalausbreitung herausgefiltert wird

$$p = p_0 + \tilde{p} - \rho_\infty g z. \quad (15)$$

Hierzu wird der Gesamtdruck p in einen thermodynamischen Druck p_0 , einen Stördruck \tilde{p} , sowie einen hydrostatischen Druckanteil $\rho_\infty g z$ mit der Gravitationskonstante g und geeignet gewählter Umgebungsdichte ρ_∞ unterteilt. Der Druck p_0 ist im Strömungsgebiet räumlich konstant. Die hieraus folgende Bedingung für $\rho_\infty = const.$ beschränkt das Strömungsgebiet auf den erdnahen Bereich bis ca. 1 km Höhe.

Ein Vergleich mit der dimensionslosen Druckzerlegung (7) zeigt, dass der Druck $M^2 p_2$ die Wirkung von $\tilde{p} - \rho_\infty g z$ zusammenfasst.

Durch die Einführung des Ansatzes (15) reduziert sich das Gleichungssystem (14) um die Energiegleichung, die fortan als Divergenzbedingung für das Geschwindigkeitsfeld in den Quelltermen auftritt und nicht mehr explizit gelöst wird. Wie in Abschnitt 2.2.2 erläutert, wirken sich lokale Druckstörungen nun nicht mehr im räumlich konstanten thermodynamischen Druck p_0 aus, sondern beeinflussen über den Stördruck \tilde{p} die Strömungsgeschwindigkeit. Damit bekommt der Stördruck \tilde{p} die Aufgabe, die Einhaltung der Divergenzbedingung (13) zu gewährleisten. Das \tilde{p} -Feld ist somit vom zu korrigierenden Geschwindigkeitsfeld abhängig und muss für jeden Zeitschritt neu berechnet werden. Dies geschieht im FDS-Modell durch Lösung einer Poissongleichung, die aus einer vereinfachten Impulsbilanz hergeleitet wird.

Vereinfachung der Impulsgleichung

Wird der Gradient des Druck-Zerlegungsansatzes (15) in die Impulsbilanz von (14) eingesetzt

$$\nabla p = \nabla \tilde{p} + \rho_\infty \vec{g} \quad (16)$$

entfällt der räumlich konstante p_0 -Term, so dass der Druckgradient nur noch durch den Gradienten des Stördruckes \tilde{p} , sowie den hydrostatischen Anteil $\rho_\infty \vec{g}$ mit $\vec{g} = [0, 0, -g]^T$ beeinflusst wird. Mit Hilfe der Vektoridentität

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \nabla \frac{|\vec{v}|^2}{2} - \vec{v} \times \vec{\omega}, \quad (17)$$

sowie einiger Umstellungen ergibt sich aus der Impulsgleichung (14)

die Schreibweise

$$\frac{\nabla \tilde{p}}{\rho} = -\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} - \frac{\nabla |\vec{v}|^2}{2} + \vec{v} \times \vec{\omega} + \frac{(\rho - \rho_\infty)}{\rho} \vec{g} + \frac{S_{\rho \vec{v}}}{\rho}. \quad (18)$$

Die Divergenz von (18) liefert eine Poissongleichung mit variablen Koeffizienten

$$\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \tilde{p}}{\rho} \right) = -\frac{\partial(\nabla \cdot \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\vec{v} \times \vec{\omega} - \frac{\nabla |\vec{v}|^2}{2} + \frac{(\rho - \rho_\infty)}{\rho} \vec{g} + \frac{S_{\rho \vec{v}}}{\rho} \right), \quad (19)$$

so dass der Stördruck \tilde{p} mit Hilfe eines iterativen Lösungsverfahrens berechnet werden kann.

Mit dem Ziel ein weniger rechenintensives, nicht-iteratives Verfahren einzusetzen, haben die FDS-Autoren die Poissongleichung (19) umgestellt und weiter vereinfacht. Anstelle des Stördruckes \tilde{p} wird der Quotient aus totalem Druck und Dichte $\mathcal{H} = \frac{|\vec{v}|^2}{2} + \frac{\tilde{p}}{\rho}$ als unbekannte Variable berechnet. Hierzu wird der barokline Effekt derart separiert, dass die Poissongleichung stets konstante Koeffizienten besitzt⁸. Im FDS-Programm sind hierzu zwei verschiedene Ansätze realisiert. Ganz allgemein lautet die Divergenz von (19) dann

$$\nabla \cdot \left(\underbrace{\nabla \left[\frac{|\vec{v}|^2}{2} + \frac{\tilde{p}}{\rho_\infty} \right]}_{\mathcal{H}} \right) = -\frac{\partial(\nabla \cdot \vec{v})}{\partial t} - \vec{F}, \quad (20)$$

wobei der Term \vec{F} alle weiteren konvektiven und diffusiven Einflüsse und Kräfte der Impulsbilanz zusammenfasst.

Innerhalb des Verfahrens besitzt die Größe $\nabla^2 \mathcal{H}$ die Aufgabe, die von einem Prädiktorschritt mehr oder weniger fehlerhaft abgeschätzten Größen $\rho, p_0, \vec{v}, \dots$ in einem Korrektorschritt zu korrigieren. Der richtigen Lösung von (20) kommt damit eine zentrale Bedeutung zu.

Einfluss des Anwenders

Die Gleichung (20) wird innerhalb eines Zeitschrittes in zwei unterschiedlichen diskreten Formen gelöst. Für die folgende Diskussion genügt die Darstellung einer dieser Gleichungen

$$\nabla^2 \mathcal{H}^n = -\frac{(\nabla \cdot \vec{v})^{(n+1,e)} - (\nabla \cdot \vec{v})^n}{\Delta t} - \vec{F}^n. \quad (21)$$

⁸Hintergrund ist, dass das eingesetzte Lösungsverfahren auf Basis einer Fast-Fourier-Transformation nur mit konstanten Koeffizienten arbeiten kann.

Hierbei gibt der Index n den Zeitpunkt an, zu dem der jeweilige Ausdruck gebildet werden soll. Während der Term $(\nabla \cdot \vec{v})^{(n+1,e)}$ die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes nach einem expliziten Eulerschritt zu Beginn eines jeden Zeitschrittes berechnet, repräsentiert der Term $(\nabla \cdot \vec{v})^n$ die Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes zum Beginn jedes neuen Zeitschrittes.

Wie in Abschnitt 2.2.2 bereits allgemein dargestellt, muss bei der Festlegung der Ein- oder Ausströmgeschwindigkeiten, der Wärmezufuhr und der zeitlichen Änderung von p_0 die Divergenzbedingung (13) eingehalten werden. (21) zeigt, dass eine Missachtung dieser Vorgabe unmittelbaren Einfluss auf die numerische Berechnung hat⁹.

Die sich daraus ergebenden Konsequenzen sollen an konstruierten, aber einfachen Beispielen erläutert werden.

a) Offenes Fenster in die Umgebung

Betrachtet wird ein Raum mit zwei definierten Öffnungen. Die eine Raumöffnung soll ein Entlüftungssystem darstellen, das einen vom Anwender festgelegten Volumenstrom besitzt. Die andere Öffnung ist ein geöffnetes Fenster in die Umgebung, für das keine weiteren Vorgaben gemacht werden (Setzung SURF_ID='OPEN').

Der thermodynamische Druck p_0 ist räumlich konstant und repräsentiert den auf der großen Raumskala (vergl. Abb. 2) wirkenden Luftdruck. Dieser wird sich aufgrund der Vorgänge im betrachteten Zimmer zeitlich nicht ändern. Die Divergenzbedingung wird über die vom Verfahren zu berechnende Geschwindigkeit für den Volumenstrom durch das offene Fenster eingehalten.

b) Offenes Fenster unter Windeinfluss

Beispiel a) wird dahingehend verändert, dass nun durch das Fenster ein vom Anwender vorgegebener Volumenstrom in den Raum einströmt (z.B. als Windlast). Um die Betrachtung einfach zu halten, sei die Dichte konstant. Gibt es eine Differenz zwischen dem ein- und austretenden Volumenstrom, kann das Verfahren die Divergenzbedingung nur einhalten, indem sich der thermodynamische Druck p_0 ändert.

In diesem Zusammenhang kann er nun nicht mehr als Luftdruck der Umgebung betrachtet werden, weil der Raum nach außen strömungstechnisch isoliert ist.

⁹Die gleiche Argumentation gilt auch für die hier nicht weiter angegebene zweite Poissongleichung.

c) Geschlossener Raum mit Türspalt

Während der in Abschnitt 2.2.2 vorgestellte Fall eines vollständig abgedichteten Raumes in Gebäuden eher selten auftreten wird, stellt sich die Frage, wie ein Raum mit Ritzen und Öffnungen diesbezüglich zu bewerten ist. In [22] wurde hierfür das Musterbeispiel eines Zimmers mit einer geschlossenen Zimmertür gewählt, in dem sich eine Wärmequelle befindet. Zwischen Fußboden und Türunterkante gibt es einen schmalen Türspalt. Hinter der Tür befindet sich ein Flur mit einem geöffneten Fenster.

Damit liegt der Türspalt innerhalb des Rechengebietes und stellt eine direkte Verbindung des Zimmers mit dem im Flur geöffneten Fenster zur Umgebung dar. Somit repräsentiert p_0 den im gesamten Strömungsgebiet räumlich konstanten Luftdruck. Da dieser durch die Wärmezufuhr in das Teilströmungsgebiet des Zimmers nicht beeinflusst wird, kann nach (13) die zugeführte Wärmeenergie nur in eine Geschwindigkeitsänderung umgewandelt werden, um die Divergenzbedingung zu erfüllen. Je nach zugeführter Wärmeleistung können die am Türspalt auftretenden Geschwindigkeiten schnell um mehrere Größenordnungen ansteigen und damit die Grundannahme $M \mapsto 0$ bzw. $v \ll c$ verletzen. Das Programm rechnet dann außerhalb der durch das Modell gesetzten Anwendungsgrenzen.

d) Geschlossener Raum mit Wärmequelle

Der Raum sei nun vollständig geschlossen, d.h. über die Gebietsberandung soll kein Strömungsaustausch stattfinden. Im Raum befindet sich eine Wärmequelle, die den Raum aufheizt. Die bei der Wärmezufuhr im Raum entstehenden Strömungsgeschwindigkeiten bleiben gering und können für die weitere Betrachtung vernachlässigt werden.

Damit die Divergenzbedingung (13) erfüllt ist, muss nun der thermodynamische Druck p_0 ansteigen. Dies geschieht solange, bis der Gesamtdruck p nach (15) zu einem Bauteilversagen führt (z.B. Bruch der Fensterscheibe). Das Bauteil wird in diesem Fall durch den thermodynamischen Druckanstieg zerstört, der Stördruck bzw. hydrodynamische Druck \tilde{p} ist aufgrund der geringen Strömungsgeschwindigkeiten nicht daran beteiligt¹⁰.

¹⁰In der Version FDS 4 steht dem Anwender der thermodynamische Druck p_0 leider nicht als Ausgabeoption zur Verfügung. Er wird jedoch in die .out Datei geschrieben. In der Version 5 soll nach Auskunft von Kevin McGrattan auch der Druck p_0 bereitgestellt werden.

Sicherheitshalber bricht das FDS-Programm mit einem sogenannten „error-flag“ ab, wenn die Divergenzbedingung nicht eingehalten werden kann. Dies schützt den Anwender jedoch nicht davor die berechnete Lösung falsch zu interpretieren, wenn er die seiner Berechnung zugrundeliegenden Modellannahmen nicht kennt.

Dies gilt neben der bereits diskutierten Divergenzbedingung insbesondere für die Interpretation der verschiedenen Drücke. Weder der in der Programmbeschreibung [16] angeführte Stördruck \tilde{p} , noch die Hilfsgröße \mathcal{H} beschreiben den tatsächlichen Gesamtdruck p nach (15). Ebenso wenig lassen sich mit dem FDS-Programm Explosions- oder Detontationsvorgänge berechnen, da hierfür die Berücksichtigung der Schallgeschwindigkeit notwendig ist. Diese ist jedoch aus den betrachteten Gleichungen herausgefiltert worden.

2.4 Beispiel: Iterative Lösungsverfahren

Bisher wurde die Einhaltung der Divergenzbedingung (8) nur anhand der Verfahrenskonstruktion und der vom Anwender zu definierenden Randbedingungen diskutiert. Dies war möglich, da FDS ein spezielles direktes Lösungsverfahren einsetzt. Zahlreiche weitere Brandsimulationsprogramme setzen hingegen in der Regel iterative Lösungsverfahren im Rahmen von SIMPLE-Typ-Verfahren oder Projektionsverfahren zur Einhaltung der Divergenzbedingung ein. Kann der Anwender – je nach Programmgestaltung – die Toleranzgrenzen für diese iterativen Löser vorgeben, beeinflusst er damit sowohl die Rechengeschwindigkeit des Programms, als auch die Güte des Iterationsergebnisses. Sind ihm hierbei die oben beschriebenen Zusammenhänge nicht bewusst, kann es bei geschwindigkeitsoptimierter Gestaltung zu unphysikalischen Lösungen kommen. Mit der Verletzung der Divergenzbedingung wird dem problemangepassten Gleichungssystem die Grundlage entzogen.

Die vorgegebene Toleranzgrenze ist ein globaler Wert, d.h. dass im Mittel über das gesamte Strömungsgebiet der Iterationsfehler die Toleranzgrenze nicht überschreiten darf. Dies bedeutet, dass an lokalen Stellen im Strömungsgebiet durchaus sehr große Fehler auftreten können, wenn der Fehler im restlichen Strömungsgebiet sehr klein ist. Durch die Vorgabe großer Toleranzen können diese lokalen Fehler Größenordnungen erreichen, die die berechnete Lösung unphysikalisch werden lassen.

3 Grundlagen der Numerik

Während im vorherigen Abschnitt der Einfluss von Annahmen bei der Modellbildung thematisiert wird, beschäftigt sich dieser Abschnitt mit einigen wesentlichen Grundlagen der Verfahrensbildung und Numerik. Obwohl die bei der Diskretisierung des aufgestellten Modellproblems getroffenen Entscheidungen für den Anwender in der Regel unveränderlich sind, sollte auch der Anwender über die grundlegenden Zusammenhänge der eingesetzten Verfahren informiert sein. Dieser Abschnitt zeigt anhand einiger ausgewählter Beispiele warum.

Wie bereits erwähnt, wird das zu lösende mathematisch-physikalische Modellproblem durch ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem mit Rand- und Anfangsbedingungen repräsentiert. Eine analytische Lösung¹¹ für dieses Gleichungssystem ist derzeit unbekannt, so dass nur mit Hilfe numerischer Verfahren eine Näherungslösung berechnet werden kann.

Bereits 1902 postulierte Hadamard wesentliche Anforderungen an ein derartiges Modellproblem (also Gleichungen, Anfangs- und Randbedingungen), damit es überhaupt einen Lösungsbeitrag liefern kann. Hadamard forderte

1. den Nachweis, dass überhaupt eine Lösung existiert. Für die Navier-Stokes-Gleichungen, u.a. eine Grundlage der Brandsimulationsprogramme, ist dieser Nachweis für Strömungen in drei Raumdimensionen bis heute nicht erbracht worden¹². Der Nachweis, dass es keine Lösung gibt, allerdings auch nicht. Die erfolgreiche Anwendung von darauf beruhenden CFD-Programmen in zahlreichen Anwendungsgebieten bestärkt bislang die Vermutung, dass das Fehlen des Nachweises nur durch dessen mathematische Komplexität bedingt ist.
2. dass die Lösung eindeutig ist. Das heißt, dass es für ein Modellproblem nur eine einzige Lösung geben kann und nicht mehrere (bspw. liefert $x^2 - 1 = 0$ sowohl $x_1 = 1$ als auch $x_2 = -1$).
3. dass das eingesetzte numerische Lösungsverfahren stabil ist. Das

¹¹Unter dem Begriff analytische Lösung wird in der Numerik eine Lösung verstanden, die durch Verwendung mathematischer Regeln in der Symbolsprache ermittelt werden kann. Bspw. wäre $x = \pm 1$ die analytische Lösung von $x^2 - 1 = 0$.

¹²Das 3d-Problem gehört zu den 7 Millennium Problemen, für deren Lösung ein Preisgeld in Höhe von je 1 Million Dollar vom Clay Mathematics Institute of Cambridge, Massachusetts (CMI) ausgesetzt ist [1, 5].

bedeutet, dass kleine Änderungen in den Eingangsdaten auch nur kleine Änderungen in der Lösung verursachen. Dies ist gerade für die Anwendung wichtig, da häufig für den Rechenlauf notwendige Parameter nur grob abgeschätzt werden können. Ferner erfordern die bei den Digitalrechnern auftretenden Rundungsfehler die Einhaltung dieser Forderung.

Erst wenn alle 3 Forderungen erfüllt sind, ist das Modellproblem korrekt gestellt. Werden diese Anforderungen nicht erfüllt, repräsentiert die berechnete „Lösung“ irgendeine Problemlösung, jedoch nicht zwangsläufig die der betrachteten Aufgabenstellung. Die Akzeptanz dieser mathematisch begründbaren Anforderungen fällt häufig dann besonders schwer, wenn eine derartige „Lösung“ zufällig den erwarteten Werten entspricht. Womöglich sogar besser mit experimentellen Werten übereinstimmt, als die Ergebnisse eines numerischen Verfahrens, welches diese Anforderungen erfüllt.

Es besteht das Risiko, dass das vermeintlich bessere Verfahren bereits bei geringfügigen Änderungen der Problemkonfiguration deutlichen Unsinn produziert, dies jedoch aufgrund fehlender Vergleichsdaten nicht mehr festgestellt werden kann. Somit kann nur bei dem Programm von einer allgemeinen Gültigkeit innerhalb der aufgestellten mathematisch-physikalisch motivierten Annahmen ausgegangen werden, bei dem auch die grundlegenden Anforderungen an numerische Methoden erfüllt sind.

Daraus folgt, dass sorgfältige Modellierung, Diskretisierung und Programmierung allein nicht garantieren können, dass die numerische Simulation zu aussagefähigen Ergebnissen kommt. Vielmehr benötigt auch der Programmanwender grundlegende Kenntnisse über die implementierten Modelle und verwendeten numerischen Methoden. Dies gilt um so mehr, wenn der Anwender die Möglichkeit hat, eigene Programmiererweiterungen einzufügen.

3.1 Der Diskretisierungsfehler

Für die Darstellung der partiellen Differentialgleichungen auf einem Computer müssen diese in algebraische Gleichungen umgewandelt werden. Hintergrund ist, dass die derzeitigen Computer keine kontinuierlichen Daten sondern nur diskrete Zahlenwerte verarbeiten können. Diese Einschränkung gilt nicht nur für Zahlenwerte, sondern auch für die sie betreffenden Rechenoperationen.

Der Strömungsbereich (genauer das Integrationsgebiet) wird in ein Gitternetz aus diskreten Punkten unterteilt. An diesen diskreten Punkten sind die geometrischen Koordinaten und die betrachteten Größen definiert. Beispielhaft soll dies an der Umwandlung des Gradienten $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ erläutert werden, der graphisch die Steigung des betrachteten Größenverlaufes von ϕ repräsentiert. Auf einem kartesischen Gitter mit der Gitterweite Δx wird die Approximation des Gradienten $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ am Punkt i gesucht. Im vorliegenden Beispiel geschieht dies durch die Verwendung von Differenzenausdrücken, die einen genügend stetigen und differenzierbaren Verlauf der betrachteten Größe voraussetzen. Aus einer Taylorreihenentwicklung für ϕ_{i+1} um den Punkt i

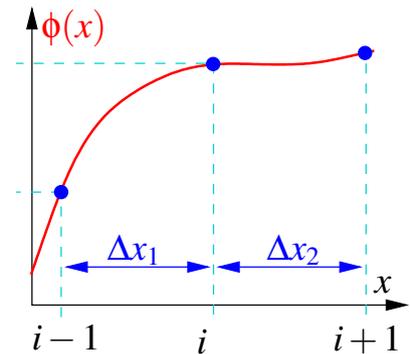


Abbildung 3:
Diskretisierung eines Gradienten

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \cdot \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i \cdot \frac{\Delta x^2}{2!} + \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i \cdot \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (22)$$

folgt durch Umstellen eine algebraische Bestimmungsgleichung für den gesuchten Gradienten

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \underbrace{\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i \cdot \frac{\Delta x}{2!} - \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i \cdot \frac{\Delta x^2}{3!} - \dots}_{\text{Abbruchfehler } \varepsilon} \quad (23)$$

In (23) wird die Berechnung des Gradienten nach dem ersten Term abgebrochen. Der nächstfolgende Term bestimmt dann maßgeblich die Größe des Abbruchfehlers ε , der den Einfluss der noch folgenden Terme der Reihenentwicklung repräsentiert. Dies entspricht der Differenz zwischen der Differentialform und der Differenzenapproximation

$$\varepsilon \equiv \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\Delta \phi}{\Delta x}. \quad (24)$$

Konvergenz

Dies ist für das Verständnis numerischer Berechnungen von elementarer Bedeutung. Es bedeutet, dass für kleiner werdende Δx auch der

Abbruchfehler klein werden muss

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \varepsilon = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \cdot \frac{\Delta x}{2!} + \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \cdot \frac{\Delta x^2}{3!} + \dots \right) = 0. \quad (25)$$

Das heißt, dass die numerisch approximierte Lösung für kleiner werdende Δx in die exakten Lösung übergeht. Derartige Lösungen werden als konvergent bezeichnet. Mit Hilfe von gezielten Konvergenzstudien¹³ lassen sich in Programme implementierte Verfahren auf die Einhaltung dieser Konvergenzeigenschaft überprüfen.

Ordnung des Verfahrens

Aus (23) kann noch eine weitere wesentliche Eigenschaft dieser Diskretisierung abgeleitet werden. Der Abbruchfehler enthält die in der Approximation des Gradienten nicht berücksichtigten Produkte der höheren Ableitungen der Taylorreihenentwicklung mit den Potenzen der Gitterweite. Bei geeigneter Normierung (vergl. auch 2.2) besitzen die betrachtete Größe ϕ , sowie einige ihrer niedrigen Ableitungen die Größenordnung $O(1)$. Für die Gitterweite sollte dann $\Delta x \ll 1$ gelten, d.h. dass die Größenordnung des Abbruchfehlers ε wesentlich durch die kleinste auftretende Potenz der Gitterweite bestimmt wird

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \cdot \frac{\Delta x}{2!} > \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \cdot \frac{\Delta x^2}{3!}. \quad (26)$$

Die Größenordnung des Abbruchfehlers wird auch als Ordnung des Verfahrens bezeichnet und ist ein Qualitätsmerkmal. Neben der hier angesprochenen Diskretisierung im Ort ist für zeitabhängige Terme auch eine Diskretisierung in der Zeit notwendig. Je höher die Ordnung des Verfahrens, desto besser können Gradienten dargestellt werden. Verfahren zur Strömungssimulation sind derzeit nach dem Stand der Technik zweiter Ordnung in Raum und Zeit.

3.2 Abbruch- und Rundungsfehler

Die Zahlendarstellung eines Digitalrechners erfolgt im Allgemeinen in der halblogarithmischen Form $x = \pm \text{Mantisse} \cdot b^{\text{Exponent}}$. Während der Exponent die Größe des Zahlenbereiches angibt, legt die Mantisse die Genauigkeit fest¹⁴.

¹³Hierbei wird ein und dasselbe Problem auf zunehmend feineren Gittern gerechnet.

¹⁴Änderungen zur Laufzeit eines Programms sind nicht möglich, weil die Anzahl der Speicherstellen für das Vorzeichen, die Mantisse und den Exponenten in dem verwendeten Gleitkommaformat

Datentyp	Bit	Mantisse	Zahlenbereich	
float	32	7 Stellen	$3.4e - 38$	bis $3.4e + 38$
double	64	15 Stellen	$1.7e - 308$	bis $1.7e + 308$
long double	80	19 Stellen	$3.4e - 4932$	bis $3.4e + 4932$

Tabelle 1: Beispiel für Intel-Typ Maschine (limits.h, float.h).

Die Konsequenzen dieser beschränkten Zahlendarstellung zeigen die folgenden vereinfachten Beispiele. Weiterführende Informationen zu Gleitkommaberechnungen finden sich z.B. in [7], [13].

1. Fehlerbehaftete Eingangsdaten

Die Eingangsdaten x können häufig nur in Größenordnungen abgeschätzt werden, wobei deren Eingabefehler δx sei. Bei der diskreten Abbildung dieser Daten kommt es durch die beschränkte Zahlendarstellung ferner zu Rundungsfehlern $\tilde{x} = rd(x + \delta x)$.

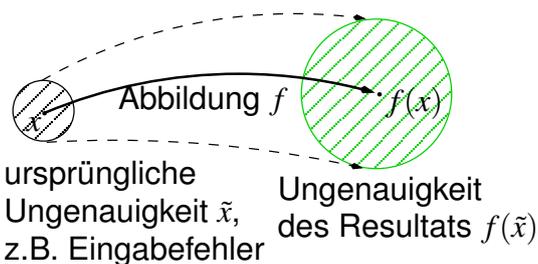


Abbildung 4:

Auswirkung von Eingabefehlern nach [13]

Die Auswirkung des Fehlers in den Eingangsdaten auf das Ergebnis wird durch die Kondition angegeben (Details siehe [13]). Sie misst die Verstärkung der Ungenauigkeit des Eingangsfehlers durch die mathematische Operation $f(\tilde{x})$ anstelle von $f(x)$ und ist von den eingegebenen Daten und der Aufgabenstellung f abhängig.

Ist die Aufgabenstellung bereits schlecht konditioniert, ist eine Fehlerverstärkung unvermeidbar, d.h. kleine Fehler in den Eingangsdaten bewirken große Fehler im Resultat, unabhängig vom verwendeten numerischen Verfahren.

2. Stabilität des Algorithmus

Bei jeder numerisch durchgeführten mathematischen Operation wird das Ergebnis gerundet. So wird aus der Subtraktion $x - y$ nu-

festgelegt sind. Rechnungen auf verschiedenen Maschinen führen deshalb nur dann zu bitweise identischen Ergebnissen, wenn jede dieser Maschinen mit derselben Festlegung arbeitet. Aus diesem Grund wurden für die Darstellung von Gleitkommazahlen Standards wie der IEEE 754 und IEEE 854 eingeführt.

merisch $rd(rd(x + \delta x) - rd(y + \delta y))$. Zu dem ggfs. verstärkten Eingangsfehler kommt mit jeder numerischen Operation ein weiterer Rundungsfehler hinzu.

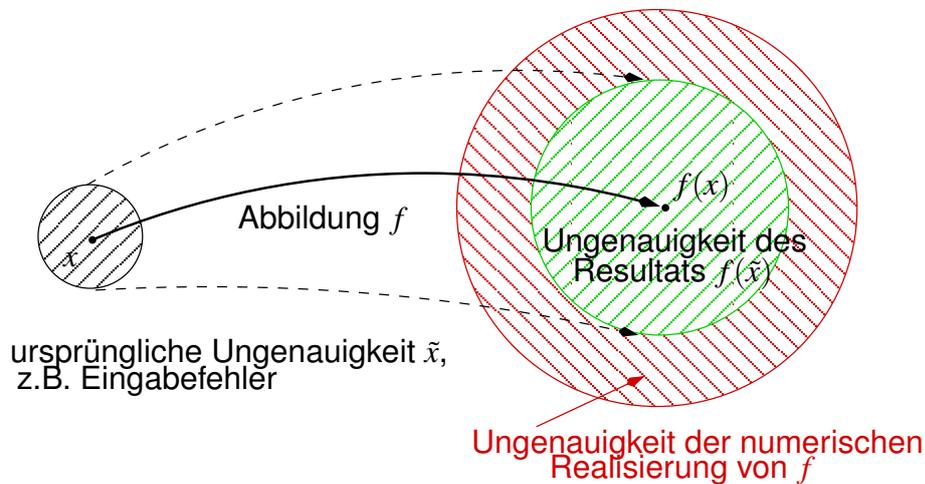


Abbildung 5: Rundungsfehler bei numerischen Operationen [13]

Verfahren, die nur zu einer leichten zusätzlichen Fehlerverstärkung führen, werden stabil genannt. Dass auf die Fehlerverstärkung auch die Reihenfolge der Operationen Einfluss hat, zeigt das folgende Beispiel

Das Assoziativgesetz fordert $(a + b) + c = a + (b + c)$. Sei ε die kleinste darstellbare Zahl, für die numerisch gilt $(1 + \varepsilon)_{num.} \neq 1$, $a = 1$ und $b = c = \frac{\varepsilon}{2}$, dann folgt:

$$\begin{aligned} (a + b) + c &= (1 + \frac{\varepsilon}{2}) + \frac{\varepsilon}{2} = (1 + \frac{\varepsilon}{2})_{num.} = 1 \\ a + (b + c) &= 1 + (\frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2}) = (1 + \varepsilon)_{num.} \neq 1. \end{aligned}$$

3. Abbruchfehler

Erfolgt die numerische Lösung mit Hilfe von Iterationsverfahren, entsteht ein Abbruchfehler, weil die diskrete Iteration nie bis zur mathematischen Konvergenz durchgeführt werden kann, sondern durch den darstellbaren Zahlenbereich des verwendeten Digitalrechners begrenzt wird.

Damit stehen zur Beurteilung eines numerischen Problems zwei Qualitätskriterien zur Verfügung. Während die Stabilität eine Eigenschaft des Algorithmus ist, gibt die Kondition die Fehlerverstärkung durch die definierte Problemstellung wieder. Es liegt somit in der Verantwortung des Anwenders möglichst gut konditionierte Probleme zu definieren und die hierfür geeigneten Algorithmen einzusetzen.

3.3 Bedeutung für den Anwender

Aus den vorgestellten numerischen Grundlagen lassen sich weitere elementare Zusammenhänge der vom Anwender festgelegten Gitterweite für derartige Verfahren ableiten:

Aussage über den Approximationsfehler

Mit der Wahl der Gitterweite bestimmt der Anwender die Größe des Approximationsfehlers seiner Rechnung. Kann er die Gitterweite im betrachteten Strömungsgebiet variieren, führt dies zu lokal unterschiedlichen Approximationsfehlern im Rechengebiet. Treten zwischen zwei Gitterzellen große Unterschiede in der Gitterweite auf, führt dies auch zu einem entsprechenden Sprung im Approximationsfehler.

Lösungseigenschaften

Mit dem Approximationsfehler sind auch die Lösungseigenschaften der Differenzenapproximation verknüpft. Werden Terme höherer Ordnung nicht berücksichtigt, hat dies unmittelbare Auswirkungen auf die Wiedergabe des modellierten physikalischen Prozesses. Trotz möglicher Unsicherheiten bei der Bestimmung der Anfangs- und Randwerte beeinflusst die Berücksichtigung der Terme höherer Ordnung die qualitative Wiedergabe.

Dies lässt sich durch die Interpretation der verschiedenen Ableitungen erläutern. Während die erste Ableitung die Steigung einer Funktion repräsentiert, berücksichtigt die zweite Ableitung das Krümmungsverhalten der Funktion. Wird dieses Krümmungsverhalten – wie in (23) – nicht berücksichtigt, können bei gleicher Gitterweite möglicherweise wesentliche Strömungseigenschaften nicht dargestellt werden.

Auflösung von Strömungsstrukturen

Da auf dem diskreten Gitternetz die Größen nur auf den Knotenpunkten definiert sind, kann der Verlauf der Größen zwischen diesen Knotenpunkten wiederum nur approximiert werden. Bei der Festlegung der Gitterweite muss der Anwender wissen, wie groß die Längenskalen der kleinsten Strömungsstrukturen sind, die auf dem betrachteten Gitter noch aufgelöst werden sollen. Auf der derart ermittelten Skala müssen mindestens so viele Stützstellen (Gitterpunkte) eingesetzt werden, dass der Kurvenverlauf ausreichend genau approximiert werden kann. Davon ausgenommen sind dynamisch adaptive Verfahren, die während der Rechnung anhand geeignet gewählter Kriterien lokale Gitterverfeinerungen vornehmen.

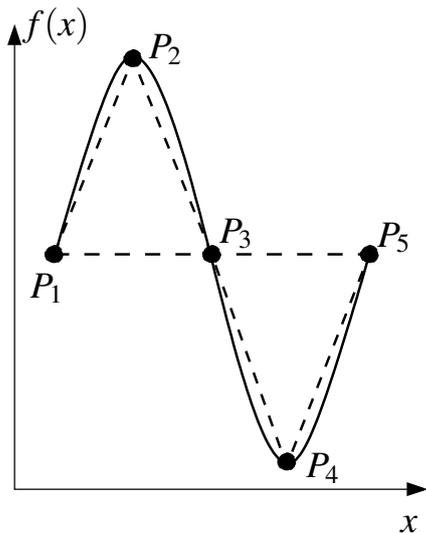


Abbildung 6:
Approximation einer Sinusfunktion

Je komplizierter der Verlauf der darzustellenden Größen ist, desto mehr Stützstellen sind für eine gute Wiedergabe notwendig. So sind für die approximierte Darstellung einer Sinusfunktion mindestens etwa 5 Punkte pro Periode notwendig. Enthält der abzubildende Funktionsverlauf Sprünge oder starke Gradienten, wie bspw. bei Druckstößen oder quer zu Flammenfronten, lassen sich diese Sprünge in der Regel nicht mehr durch eine feinere Auflösung darstellen. Die hierzu erforderlichen Gitterweiten werden für reale Probleme schnell die verfügbaren Rechenkapazitäten übersteigen.

Ist eine „Verschmierung“ des Funktionsverlaufes über einen solchen Sprung nicht akzeptabel, weil bspw. wesentliche physikalische Eigenschaften nicht mehr richtig dargestellt werden können, erfordert dies spezielle numerische Techniken¹⁵.

4 Zusammenfassung

Die allgemeinen dimensionsbehafteten konservativen Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden für eine einfachere Diskussion der wesentlichen strömungsmechanischen Einflüsse auf die Eulergleichungen reduziert. Durch eine anschließende Entdimensionierung und Normierung der Eulergleichungen lässt sich als dimensionslose Kennzahl die Mach-Zahl bilden. Sie zeigt, dass die in den Bilanzen auftretenden Terme einen unterschiedlichen Einfluss auf die Lösung ausüben. Ferner wird deutlich, dass die Struktur des Gleichungssystem wesentlich durch die Schallgeschwindigkeit beeinflusst wird. Dies konnte aus den dimensionsbehafteten Bilanzgleichungen nicht abgeleitet werden.

Die Berücksichtigung der Schallgeschwindigkeit ist für die Beschreibung der Rauch- und Wärmeausbreitung in Gebäuden von geringeren Interesse, erfordert jedoch erhebliche Rechenkapazitäten. Mit den

¹⁵Ein Möglichkeit stellen die Level-Set Methoden dar. Sie werden von *Sethian* [29, 30] erläutert und z.B. in [23, 26] für Verbrennungsanwendungen erweitert.

Ergebnissen einer asymptotischen Analyse werden Bilanzgleichungen hergeleitet, die den Einfluss der Schallwellen herausfiltern. Die Verwendung dieser Bilanzgleichungen erfordert jedoch die Einhaltung einer Divergenzbedingung. Am Beispiel des Programms Fire Dynamic Simulator wird der Einfluss der Divergenzbedingung diskutiert.

Neben Kenntnissen über das im Programm eingesetzte Modell und die damit verknüpften Annahmen, müssen dem Anwender bei der Verwendung numerischer Lösungsverfahren weitere Zusammenhänge bekannt sein. Als wesentliche Grundlagen für die Anwendung numerischer Lösungsverfahren werden die Begriffe Diskretisierungsfehler, Konvergenz, Verfahrensordnung, sowie die Bedeutung von Abbruch- und Rundungsfehlern erläutert. Anhand der vom Anwender festzulegenden Gitterweite wird ihre Bedeutung für die Güte der numerischen Lösung thematisiert.

Danksagung und Hinweis

Herrn Prof. Dr.-Ing. Rupert Klein sowie Herrn Dipl.-Ing. Gunter Carqué gilt mein Dank für die Unterstützung bei der Abfassung dieses Textes. Herrn cand. math. Jonathan Gebauer danke ich für die Erstellung der Konvertierungsprogramme, die für die Visualisierung der Präsentationsbeispiele notwendig waren.

Dokument und Inhalte der gezeigten Präsentation stehen auf der Webseite des Autors <http://page.mi.fu-berlin.de/~muench> zum Download bereit.

5 Anhang

5.1 Divergenzbedingung

Das Geschwindigkeitsfeld ist ein Vektorfeld dessen Divergenz aussagt, ob und wo das Vektorfeld Quellen (Divergenz größer Null) oder Senken (Divergenz kleiner Null) hat. Das Feld ist quellenfrei, wenn die Divergenz Null ist.

Die Divergenzbedingung (13) kann auch physikalisch interpretiert werden. Hierzu wird die Definition des Gaußschen Integralsatzes benötigt. Er besagt, dass der Durchfluss durch eine geschlossene Oberfläche eines Volumens gleich dem Integral über die Divergenz des Vektorfeldes im Inneren dieses Volumens ist. Das Integral über die Divergenz lässt sich dann als das Oberflächenintegral auffassen. Hierbei ist \vec{n} der Normalenvektor, der hier per Definition von der Oberfläche weg zeigt. Die Vorzeichen der einzelnen Geschwindigkeitsterme ergeben sich dann aus Richtung des Normalenvektors \vec{n} bezogen auf das gewählte Koordinatensystem. Für ein rechteckiges Beispiel gilt dann:

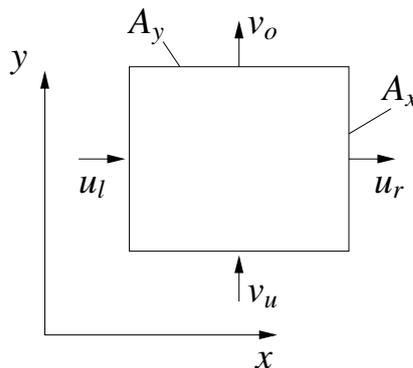


Abbildung 7: Graphische Darstellung der Divergenz

$$\int_V \nabla \cdot \vec{v} dV = \oint_A \vec{v} \cdot \vec{n} dA \approx (u_r - u_l) A_x + (v_o - v_u) A_y \quad (27)$$

Bei einem divergenzfreien Geschwindigkeitsfeld müssen sich die gegenüberliegenden Normalenvektoren gerade gegeneinander aufheben. Dies ist der Fall, wenn gilt $\vec{v} = \vec{0}$ (trivial) oder bspw. $u_l = u_r$ und $v_u = v_o$.

Literatur

- [1] *Clay Mathematics Institute of Cambridge, Massachusetts (CMI).*
<http://www.claymath.org/millennium>.
- [2] *NIST Fire Dynamic Simulator (FDS) and Smokeview.*
<http://fire.nist.gov/fds>.
- [3] **Almgren, A.; Bell, J.; Colella, P.; Howell, L.; Welcome, M.:** *A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations.* *J. Comp. Phys.*, (142):S. 1–46, 1998.
- [4] *Center for Computational Sciences and Engineering, Berkley Lab.*
<http://seesar.lbl.gov/ccse>.
- [5] *Navier-Stokes Solution Worth 1 Million Dollars.*
<http://www.cfdreview.com/articles/02/07/23/0314223.shtml>.
- [6] *Efficient Mathematical Modelling, Earth and Life Science.* Interdisziplinäres Zentrum, <http://emm.mi.fu-berlin.de>.
- [7] **Goldberg, D.:** *What Every Computer Scientist Should Know About Floating-Point Arithmetic.* *ACM Computing Surveys*, Bd. 23(1):S. 5–48, 1991.
- [8] **Hosser, D. (Hg.):** *vfdb-Leitfaden, Ingenieurmethoden des Brandschutzes, Entwurf.* Vereinigung zur Förderung des Deutschen Brandschutzes, 2005.
- [9] **Klainerman, S.; Majda, A.:** *Compressible and Incompressible Fluids.* *Comm. Pure Appl. Math.*, Bd. 35:S. 629–653, 1982.
- [10] **Klein, R.:** *Semi-Implicit Extension of a Godunov-Type Scheme Based on Low Mach Number Asymptotics I: One-Dimensional Flow.* *Journal of Computational Physics*, Bd. 121:S. 213–237, 1995.
- [11] **Klein, R.:** *Numerics in Combustion.* In *Introduction to Turbulent Combustion*, VKI Lecture Series, S. 1–60. von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode-Saint-Genese, Belgium, 1999.

- [12] **Klein, R.; Botta, N.; Schneider, T.; Munz, C.-D.; Roller, S.; Meister, A.; Hoffmann, L.; Sonar, T.:** *Asymptotic adaptive methods for multi-scale problems in fluid mechanics. Journal of Engineering Mathematics*, Bd. 39:S. 261–343, 2001.
- [13] **Kornhuber, R.; Schütte, C.; Krause, R.; Gebauer, S.; Fischer, A.; Weiser, M.:** *Computerorientierte Mathematik I*. Institut für Mathematik II, FU-Berlin, Arnimallee 2-6, 14195 Berlin.
- [14] **Majda, A.; Sethian, J.:** *The Derivation and Numerical Solution of the Equations for Zero Mach Number Combustion. Combustion Science and Technology*, Bd. 42:S. 185–205, 1985.
- [15] **McGrattan, K. B. (Hg.):** *Fire Dynamics Simulator (Version 4) – Technical Reference Guide*. Special Publication 1018. National Institute of Standards and Technology Building and Fire Research Laboratory, National Institute of Standards and Technology Building and Fire Research Laboratory, 4. Aufl., September 2005.
- [16] **McGrattan, K. B.; Forney, G. (Hg.):** *Fire Dynamics Simulator (Version 4) – User’s Guide*. Special Publication 1019. National Institute of Standards and Technology Building and Fire Research Laboratory, National Institute of Standards and Technology Building and Fire Research Laboratory, 4. Aufl., September 2005.
- [17] **Meister, A.:** *Zur Mathematischen Fundierung einer Mehrskaligen Analyse der Eulergleichungen. Reihe F, Computational Fluid Dynamics and Data Analysis 1, Hamburger Beiträge zur Angewandten Mathematik*, Juli 1997.
- [18] **Münch, M.:** *MOLOCH – Ein Strömungsverfahren für inkompressible Strömungen*. Technischer Bericht, PIK-Report, Potsdamer Institut für Klimafolgenforschung e.V. 2005, in Druck.
- [19] **Noll, B.:** *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hongkong, Barcelona, Budapest, 1993.
- [20] **Oevermann, M.:** *Private Kommunikation*.
- [21] **Pember, R.; Howell, L.; Bell, J.; Colella, P.; Crutchfield, W.; Fiveland, W.; Jessee, J.:** *An Adaptive Projection Method for*

Unsteady, Low-Mach Number Combustion. Comb. Sci. Tech., Bd. 140:S. 123–168, 1998.

- [22] **Rehm, R. G.; Baum, H. R.:** *The Equations of Motion for Thermally Driven Buoyant Flows. Journal of Research, Bd. 83(3):S. 297–308, 1978.*
- [23] **Schmidt, H.:** *Ein numerisches Verfahren zur Verfolgung von Vormischflammen unter Berücksichtigung instationärer Frontstrukturen. Dissertation, Fachbereich Maschinenbau der Gerhard-Mercator-Universität – Gesamthochschule Duisburg, 2002.*
- [24] **Schneider, T.:** *Verfolgung von Flammenfronten und Phasengrenzen in schwach-kompressiblen Strömungen. Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen RWTH-Aachen, 2000.*
- [25] **Schneider, T.; Botta, N.; Geratz, K.; Klein, R.:** *Extension of Finite Volume Compressible Flow Solvers to Multi-dimensional, Variable Density Zero Mach Number Flow. Journal of Computational Physics, Bd. 155:S. 248–286, 1999.*
- [26] **Schneider, T.; Klein, R.:** *Overcoming Mass Losses in Level-Set-Based Interface Tracking Schemes. 2nd Int. Conf. on Finite Volume for Complex Applications -Problems and Perspectives, 19.-22. July 1999, Duisburg, Deutschland, R. Vilsmeier et al. (eds.), Editions Hermes, S. 10, July 1999.*
- [27] **Schneider, U.; Seifert, U.:** *Aspekte der experimentellen Brandmodellierung. vfdb-Zeitschrift, Bd. 52(2):S. 43–58, 2003.*
- [28] **Schochet, S.:** *Asymptotics for symmetric hyperbolic systems with a large parameter. Journal of Differential Equations, Bd. 75:S. 1–26, 1988.*
- [29] **Sethian, J.:** *Level Set Methods. Cambridge University Press, 1996.*
- [30] **Sethian, J.:** *Level Set Methods and Fast Marching Methods. Cambridge University Press, 1999.*
- [31] *Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport. DFG Sonderforschungsbereich 359, Universität Heidelberg, <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/sfb359>.*

- [32] *Strömung und Verbrennung in zukünftigen Gasturbinenbrennkammern*. DFG Sonderforschungsbereich 568, TU-Darmstadt, <http://www.sfb568.de>.
- [33] *Instationäre Verbrennung: Transportphänomene, Chemische Reaktion, Technische Systeme*. DFG Sonderforschungsbereich 606, Universität Karlsruhe, <http://www.sfb606.uni-karlsruhe.de/>.
- [34] **Wendt, J. F.** (Hg.): *Computational Fluid Dynamics, An Introduction*. Springer Verlag, 1992.
- [35] **Wesseling, P.**: *Principles of Computational Fluid Dynamics*, Bd. 29. Springer Series in Computational Mathematics, Berlin, Springer, 2000.