

## Parallele adaptive Simulation mehrdimensionaler Detonationsstrukturen

Reaktive Strömungen werden von komplexen mehrdimensionalen Wechselwirkungseffekten zwischen hydrodynamischen Transportvorgängen und chemischer Reaktion bestimmt. Viele Phänomene sind bis heute nicht ausreichend verstanden. Eine außerordentlich schwierige Problemklasse stellen Detonationen in der Gasphase dar, die im Rahmen von Sicherheitsanalysen, aber auch für neuartige Raketenantriebskonzepte von großer technischer Bedeutung sind.

Das Strömungsfeld einer Detonationswelle (Ausbreitungsgeschwindigkeit 1000 bis 2000m/s) ändert sich drastisch innerhalb weniger Mikrosekunden und selbst Grundlagenexperimente sind mit erheblichen Ungenauigkeiten behaftet. Wichtige Kenngrößen, wie z.B. die Maximaltemperatur in sogenannten Tripelpunkten (ein transientes Überlagerungsphänomen von transversalen Schockwellen und der Detonationsfront), sind messtechnisch kaum zu erfassen. Direkte numerische Simulationen der beschreibenden Grundgleichungen, der Eulergleichungen thermisch perfekter Gasspezies, sind daher im Besonderen geeignet, das Experiment zu komplettieren bzw. zu ersetzen.

Die Dissertationsschrift „Parallele adaptive Simulation mehrdimensionaler Detonationsstrukturen“<sup>1</sup> von Dr. rer. nat. Ralf Deiterding ist der Entwicklung effizienter Simulationstechniken für praktisch relevante Detonationskonfigurationen gewidmet. Das Mehrskalproblem bei der numerischen Approximation von Detonationswellen wird mittels eines blockstrukturierten selbstadaptiven Finite-Volumen-Verfahrens gelöst. Die Methodik ist insbesondere auf sogenannte Upwind-Diskretisierungen zugeschnitten und verwendet eine Hierarchie rekursiv verfeinerter Untergitter. Ein umfangreiches Kapitel ist der mathematischen Herleitung und Analyse derartiger Diskretisierungen gewidmet. Eine effektive Parallelisierungsstrategie, die sowohl für Großrechenanlagen als auch für Standard-PC-Cluster geeignet ist, wird entworfen und umgesetzt.

Zahlreiche hochaufgelöste Simulationen transienter Strukturen in Wasserstoff-Sauerstoff-Detonationen schließen die Arbeit ab und demonstrieren die Effizienz des Gesamtansatzes, sowie die Leistungsfähigkeit der entwickelten Diskretisierungen. Im Besonderen werden Tripelpunktbahnen unter veränderlichen Bedingungen, z.B. beim Austritt einer Detonation aus einem Diffusor (vgl. Bild 1) und erstmals für ein realistisches Reaktionsnetzwerk in drei Raumdimensionen präsentiert. Die Ergebnisse gehen wesentlich über bisherige Veröffentlichungen hinaus und liefern neue Referenzlösungen.

---

<sup>1</sup> Originaltitel: “Parallel adaptive simulation of multi-dimensional detonation structures”

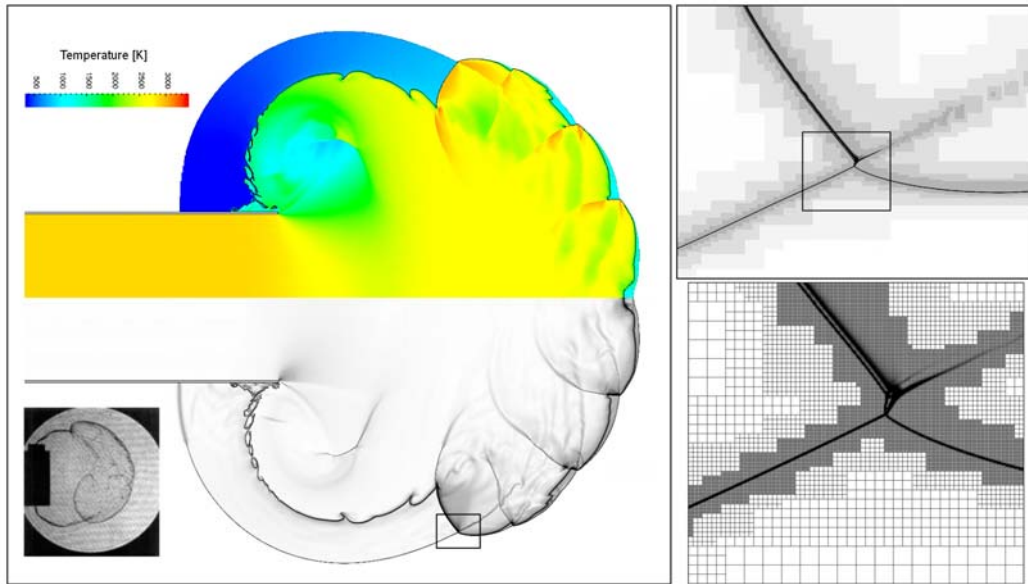


Bild 1: Planare Simulation einer Wasserstoff-Sauerstoff-Detonation 240 Mikrosekunden nach Verlassen eines Diffusors mit *kritischem* Durchmesser. Links: Qualitativer Vergleich von simuliertem Temperatur- und Schlierenfeld mit dem Experiment (links unten). Rechts: Hierarchische Gitteradaption um einen Tripelpunkt im links markierten Bereich (oben) und verwendete Finite-Volumen-Triangulierung (unten).

### **Kurzbiographie Dr. rer. nat. Dipl.-Math. Ralf Deiterding**

geboren am 30.8.1971 in Osterode am Harz

1977-1983: Grundschule und kooperative Gesamtschule Bad Lauterberg

1984-1990: Robert-Koch-Gymnasium Clausthal

Februar 1990 bis September 1992: Wehrdienst

Oktober 1992 bis Januar 1998: Studium der Technomathematik an der Technischen Universität Clausthal

Februar 1998 bis April 2003: Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl „Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen“ der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus, Prof. Dr. rer. nat. habil Georg Bader

Projekt „Theoretische Analyse und numerische Simulation der Strömung von Mehrkomponentengasen mit und ohne chemische Reaktion“ im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms „Analysis und Numerik von Erhaltungsgleichungen“

seit Juli 2003: Postdoctoral Scholar in Applied and Computational Mathematics, DOE ASCI Center for “Simulating the Dynamic Response of Materials” at the California Institute of Technology, Pasadena, USA