

Kapitel 3

Numerische Behandlung des Modells

Das Gleichungssystem für das in Kapitel 2 beschriebene Modell hat die Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{F} = \mathbf{Q} \quad (3.1)$$

wobei der Fluß \mathbf{F} selbst wieder Ortsableitungen 1. Ordnung enthält. Mathematisch gesehen handelt es sich um ein quasilineares gekoppeltes partielles Gleichungssystem mit den zwei unabhängigen Variablen t und x . Die Ansätze für den Spannungstensor und die Wärmeleitung (im Flußvektor \mathbf{F}) führen zu zweiten Ableitungen im Ort, durch die die Gesamtordnung des Systems 2 wird. Außerdem wird durch diese Ansätze aus dem ansonsten hyperbolischen System eines mit parabolischem Charakter. Einzelheiten hierzu sind in Anhang A aufgeführt.

Für die numerische Lösung des Systems von Differentialgleichungen wird das Verfahren der Finiten Volumen herangezogen, bei dem die zeitliche Änderung einer Größe in einem Kontrollvolumen durch Flüsse über die Volumenbegrenzungen und durch Quellterme beschrieben wird. Dazu wird eine örtliche Diskretisierung des Rechengebietes, d.h. eine Zergliederung in räumliche Teilstücke, durchgeführt. Diese wird zusammen mit den zur Flußberechnung verwendeten Verfahren im Abschnitt 3.1 beschrieben. Eine weitere in dieser Arbeit verwendete Maßnahme, nämlich die Konzentrierung von Gitterpunkten an Orten, an denen sich die Zustandsgrößen stark verändern, durch ein dynamisch adaptiertes Rechengitter, wird in Abschnitt 3.2 beschrieben. Schließlich wird in Abschnitt 3.3 das verwendete zeitliche Lösungsverfahren behandelt.

Die Kombination des verwendeten Flußberechnungsverfahrens mit dem dynamisch adaptierten Gitter wurde in der Arbeit von Uphoff [32] anhand von Testfällen für das Stoßrohrproblem und für die Entstehung einer Detonation ausführlich dargestellt.

3.1 Ortsdiskretisierung

Für die numerische Lösung wird das Rechengebiet in der Ortsrichtung x in N Rechenzellen der Breite Δx_i , $i = 1..N$ aufgeteilt. Die bilanzierte Größe in der Zelle i , \mathbf{q}_i , ändert sich zeitlich dadurch, daß

- über die Zellgrenzen, die mit $i - 1/2$ und $i + 1/2$ bezeichnet werden, die Flüsse $\mathbf{F}_{i-1/2}$ und $\mathbf{F}_{i+1/2}$ hinein- oder hinausfließen,
- der Quellterm \mathbf{Q}_i eine zeitliche Veränderung der bilanzierten Größen bewirkt.

Die örtlich diskretisierten Bilanzgleichungen haben die Form:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{q}_i + \frac{\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}}{\Delta x_i} = \mathbf{Q}_i \quad \text{mit } i = 1..N \quad (3.2)$$

Nach der Diskretisierung sind die Größen rechtechnisch nur noch mit einem Wert pro Rechenzelle bekannt (z.B. als Zellmittelwert oder als lokaler Zustand im Zellmittelpunkt). Die Zustände an den Zellrändern $i - 1/2$ und $i + 1/2$ sind also nicht mehr exakt bekannt, sodaß für die Flüsse an den Rändern Näherungen verwendet werden müssen, die zum physikalischen Fluß \mathbf{F} konsistent sind und den Gradienten $\partial \mathbf{F} / \partial x$ möglichst genau wiedergeben.

Hierfür sind in den letzten Jahren viele Lösungsansätze entwickelt worden, die auf approximativen Lösungen des sogenannten Riemann-Problems basieren. Ein Riemann-Problem ist ein Anfangswertproblem mit zwei konstanten Zuständen. Ein Beispiel sind zwei Zellen mit unterschiedlich hohen Drücken, die durch eine Membran voneinander getrennt sind. Nach Entfernung der Membran findet ein Wellenausbreitungsvorgang statt, der durch die Lösung des Riemann-Problems beschrieben wird. Abbildung 3.1 zeigt den qualitativen Druckverlauf der exakten Lösung des Riemann-Problems mit dem Expansionsfächer, in dem der Druck sich nichtlinear ändert. Die verwendeten approximativen Riemann-Löser berücksichtigen bei der Berechnung der neuen Zustände Ausbreitungsrichtungen und -geschwindigkeiten dieser Wellen (sogenannte Upwind-Verfahren), berechnen jedoch in der Regel nicht alle von der Unstetigkeit ausgehenden Wellenphänomene (z.B. den Expansionsfächer) exakt.

Ein gutes Beispiel für mögliche Strategien von Riemann-Lösern ist das Flußvektor-Splitting nach Roe. Deshalb werden die Grundgedanken für dieses Verfahren im folgenden kurz skizziert. Mit dem Flußvektor-Splitting nach Roe wird das linearisierte Bilanzgleichungssystem

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A} \mathbf{q}_x = \mathbf{Q} \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} \quad (3.3)$$

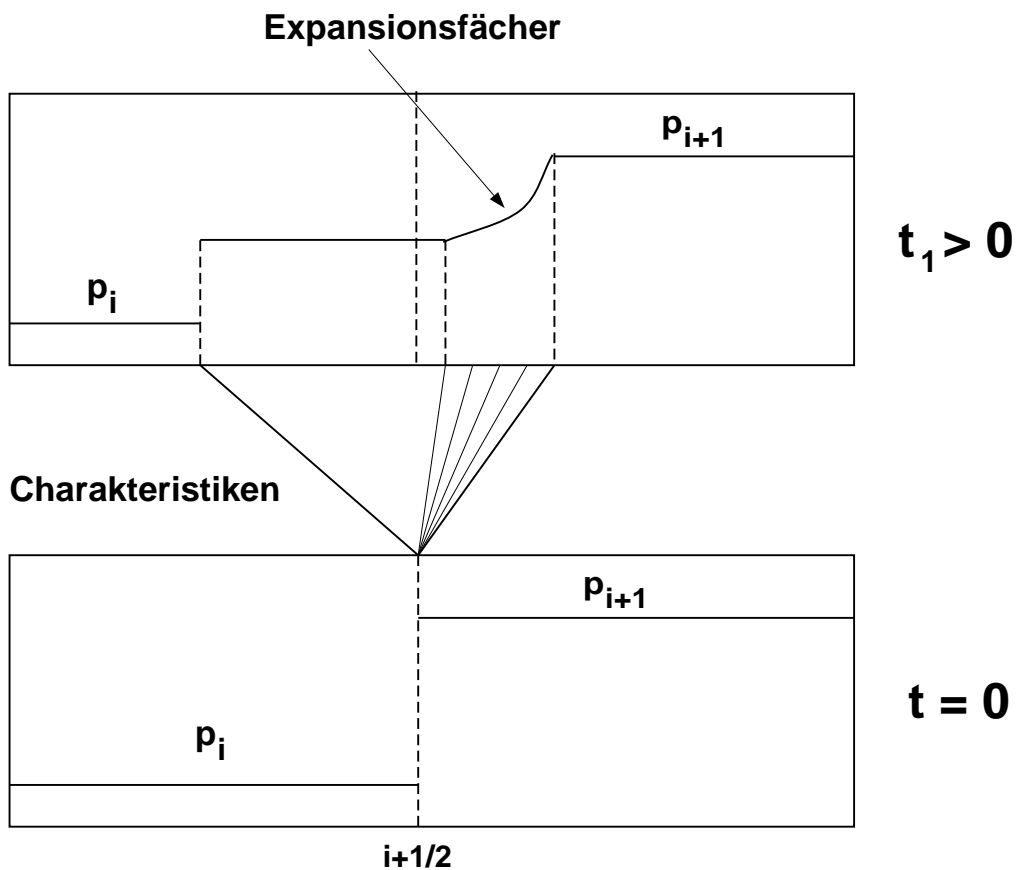


Abbildung 3.1: Riemann–Problem. Unten: Druckverlauf bei $t = 0$. Oben: Druckverlauf bei $t > 0$. Es bilden sich eine Stoßwelle und ein Expansionsfächer aus.

exakt gelöst (Matrix \mathbf{A} unabhängig von x und t). Die Indizes t und x bezeichnen partielle Ableitungen nach der Zeit t und dem Ort x . Die Vorgehensweise ist:

- Transformation des gekoppelten Gleichungssystems (3.3) in ein ungekoppeltes:

$$\mathbf{w}_t + \Lambda \mathbf{w}_x = \mathbf{Q}' \tag{3.4}$$

\mathbf{w} ist der Vektor der transformierten Variablen. Λ ist nur auf der Diagonalen mit den Eigenwerten der Jacobi–Matrix \mathbf{A} besetzt. ($\Lambda = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R}$ mit \mathbf{R} und \mathbf{R}^{-1} als den Matrizen der Rechts- und Linkseigenvektoren von \mathbf{A})

- Wahl des jeweiligen Differenzenquotienten (vorwärtsgerichtet oder rückwärtsgerichtet) für jede Komponente von \mathbf{w}_x entsprechend dem Vorzeichen des zugehörigen Koeffizienten (Eigenwert von \mathbf{A} , Signalgeschwindigkeit der jeweiligen Komponente) aus der Diagonalmatrix Λ .

- Rücktransformation in die ursprünglichen Variablen \mathbf{q}

Dann ergibt sich mit $|\mathbf{A}| = \mathbf{R} |\mathbf{\Lambda}| \mathbf{R}^{-1}$ der Roe–Fluß $\mathbf{F}_{i+1/2}$ an der Zellwand $i + 1/2$:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) + \frac{1}{2} |\mathbf{A}| (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{i+1}) \quad (3.5)$$

Dieses Verfahren ist nur exakt, wenn die Jacobi–Matrix \mathbf{A} konstant ist. Bei einigen anderen Flußformulierungen wird versucht, die in dem hier betrachteten Bilanzgleichungssystem real vorhandene Abhängigkeit der Jacobi–Matrix von den Zuständen \mathbf{q} über Korrekturterme für die Zellwandflüsse zu berücksichtigen. Möchte man trotzdem den Roe–Fluß verwenden, muß dafür Sorge getragen werden, daß die Matrix \mathbf{A} mit passenden Werten für die Zustandsgrößen \mathbf{q} gebildet wird. Ein Ansatz hierfür sind die Roe–Mittelwerte, deren Berechnung in Anhang D aufgezeigt ist.

3.1.1 Gasphase: Harten/Yee–Flußformulierung

Die Flußberechnung für die Gasphase erfolgte mit dem Verfahren von Harten und Yee [33]. Dieses Verfahren verwendet einen Flußkorrekturterm zur Erhöhung der Ordnung des Verfahrens. Der numerische Fluß hat die Form:

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1} + \overline{\mathbf{R}}_{i+1/2} \overline{\Phi}_{i+1/2}) \quad (3.6)$$

Die Flußvektoren \mathbf{F}_i und \mathbf{F}_{i+1} werden mit den Zuständen der Zellen i und $i + 1$ rechts und links der Zellwand $i + 1/2$ gebildet. Der Term $\overline{\mathbf{R}}_{i+1/2} \overline{\Phi}_{i+1/2}$ korrigiert den Zellwandfluß entsprechend der Einflußrichtung der Charakteristiken in der Strömung und wird mit den Roe–Mittelwerten (Anhang D) gebildet. Die Berechnungsvorschriften für $\overline{\mathbf{R}}_{i+1/2}$ und $\overline{\Phi}_{i+1/2}$ sind in Anhang C aufgeführt.

3.1.2 Partikelphase: Harten/Lax/van Leer–Flußformulierung

Für die Partikelphase wird der Riemann–Löser von Harten, Lax und van Leer (HLL) [34] verwendet. Er ist einfacher aufgebaut als das für die Gasphase verwendete Verfahren von Harten und Yee und erfordert deshalb weniger Rechenaufwand.

Beim HLL–Verfahren wird bei der Ausbreitung der Wellen vom Zellrand (Riemann–Problem) nur die größte und die kleinste Signalausbreitungsgeschwindigkeit für die Flußberechnung an den Zellrändern berücksichtigt. Der Zustand zwischen den beiden Charakteristiken, die durch die minimale und die maximale Signalausbreitungsgeschwindigkeit

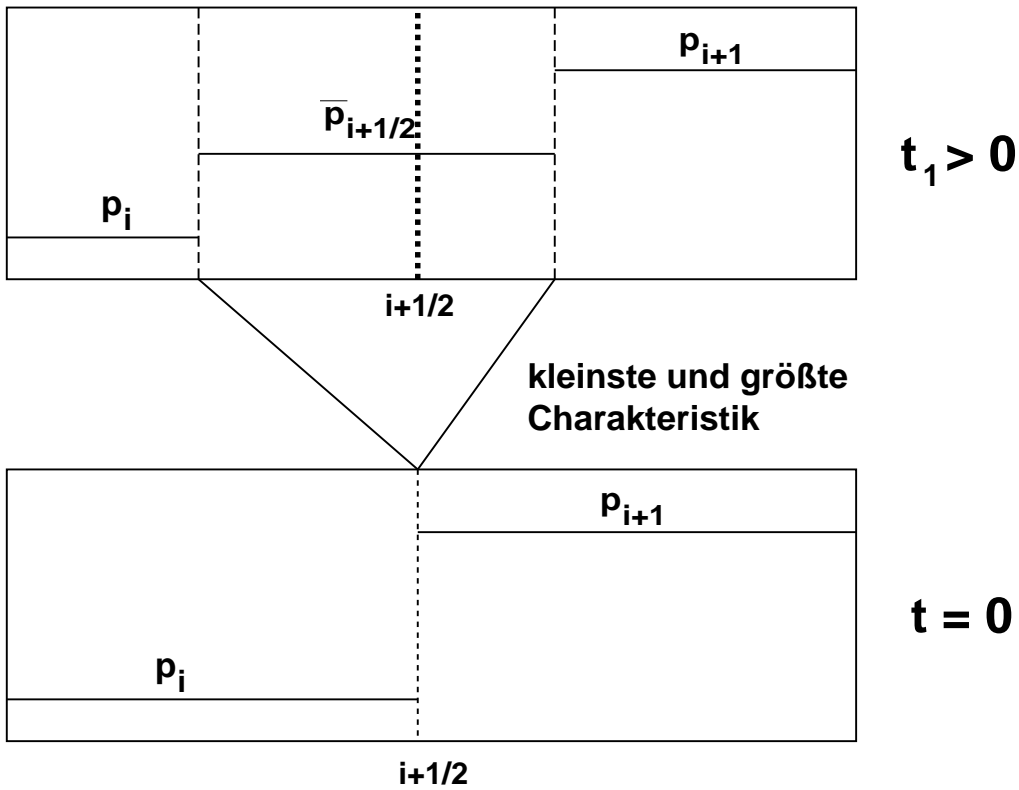


Abbildung 3.2: Riemann–Problem. Unten: Druckverlauf bei $t = 0$. Oben: HLL–Lösung bei $t > 0$. Der Zustand zwischen den äußeren Charakteristiken wird durch einen konstanten Wert $\bar{p}_{i+1/2}$ approximiert.

festgelegt werden, wird als konstant angenommen. Abbildung 3.2 verdeutlicht dieses Vorgehen.

An einer Zellgrenze $i + 1/2$ folgt dann für die j -te Komponente $F'_{i+1/2}^{(j)}$ des charakteristischen Flußvektors $\mathbf{F}'_{i+1/2}$ mit den minimalen und maximalen Signalausbreitungsgeschwindigkeiten $a_{min}^{(j)}$ und $a_{max}^{(j)}$:

$$F'_{i+1/2}^{(j)} = \frac{a_{max}^{(j)}}{a_{max}^{(j)} - a_{min}^{(j)}} F_i^{(j)} - \frac{a_{min}^{(j)}}{a_{max}^{(j)} - a_{min}^{(j)}} F_{i+1}^{(j)} + \frac{a_{max}^{(j)} a_{min}^{(j)}}{a_{max}^{(j)} - a_{min}^{(j)}} (q_{i+1}^{(j)} - q_i^{(j)}) \quad (3.7)$$

Hierin ist $q_i^{(j)}$ bzw. $q_{i+1}^{(j)}$ die j -te Komponente der charakteristischen Zustandsvektoren in Zelle i bzw. $i + 1$. Die kleinsten und größten Signalausbreitungsgeschwindigkeiten sind die kleinsten und größten Eigenwerte von $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}}$.

3.2 Dynamische Gitteranpassung

Bei der Simulation von Verbrennungswellen in einem Gefäß wie im hier untersuchten Fall stellt sich das Problem stark unterschiedlicher Längenskalen. Die Reaktionszonen sind in der Regel sehr dünn (einige Mikrometer, abhängig von Druck und Gemischzusammensetzung), während die Gehäuseabmessungen deutlich größer sind. Aber gerade in diesen dünnen Zonen laufen die für die Reaktionen entscheidenden Vorgänge ab. Aufgrund der exponentiellen Temperaturabhängigkeit der chemischen Reaktionsgeschwindigkeit müssen diese Stellen sehr gut aufgelöst werden, damit die chemischen Quellterme korrekt wiedergegeben werden.

Bei Verwendung eines Rechengitters mit gleichmäßiger Zellbreite würde diese durch die irgendwo im Rechengebiet minimal notwendige Zellbreite festgelegt. Zur Abdeckung des Rechengebietes ergäbe sich so eine unnötig große Zellenanzahl. Die numerische Beschreibung von großen Rechengebieten stößt bei äquidistanten Rechengittern schnell an die Grenzen der Rechnerkapazität bzw. führt zu hohen Rechenzeiten.

Durch die Verwendung von dynamischen, sich an das Problem anpassenden Gittern läßt sich mit geringerer Rechnerkapazität auskommen. Bei solchen Verfahren werden die Zellwände während der Rechnung derart verschoben, daß in bestimmten Gebieten, etwa denen mit starker Zustandsänderung, viele schmale Zellen liegen, während das restliche Rechengebiet mit wenigen breiten Zellen abgedeckt wird.

Die Diskretisierung in Gleichung 3.2 muß dann allerdings an die Veränderlichkeit der Zellbreiten angepaßt werden, durch die sich quasi die Kontrollvolumina der Diskretisierung zeitlich verändern können:

$$\frac{\partial(\mathbf{q}_i \Delta x_i)}{\partial t} + \mathbf{F}_{i+1/2}^{rel} - \mathbf{F}_{i-1/2}^{rel} = \mathbf{Q}_i \Delta x_i \quad (3.8)$$

Die relativen Flüsse \mathbf{F}^{rel} unterscheiden sich von den bisher beschriebenen Flüssen \mathbf{F} dadurch, daß sie die durch die Zellwandbewegung verursachte Flußänderung berücksichtigen.

Die Verfahren zur Gitteradaption lassen sich anhand des Zeitpunktes der Gitteradaption unterteilen:

- Die Gitterneuverteilung erfolgt nach einer bestimmten Zahl von Integrationsschritten anhand der dann auf dem alten Gitter vorliegenden Lösung (Remeshing).
- Die Gitterneuverteilung erfolgt kontinuierlich, also während jedes Integrations-schrittes (Dynamische Gitteradaption).

Für den ersten Fall müßte eine Vorabschätzung der für ein Remeshing sinnvollen Zeitabstände erfolgen, die aber im vorliegenden Fall von komplexen chemischen Reaktionen mit ihren stark variierenden Zeitskalen kaum möglich ist. Für die in dieser Arbeit eingesetzte dynamische Gitteradaption sind diese Vorüberlegungen nicht notwendig. Sie erfordert allerdings die Lösung eines um die Gittergleichungen erweiterten, gekoppelten Bilanzgleichungssystems.

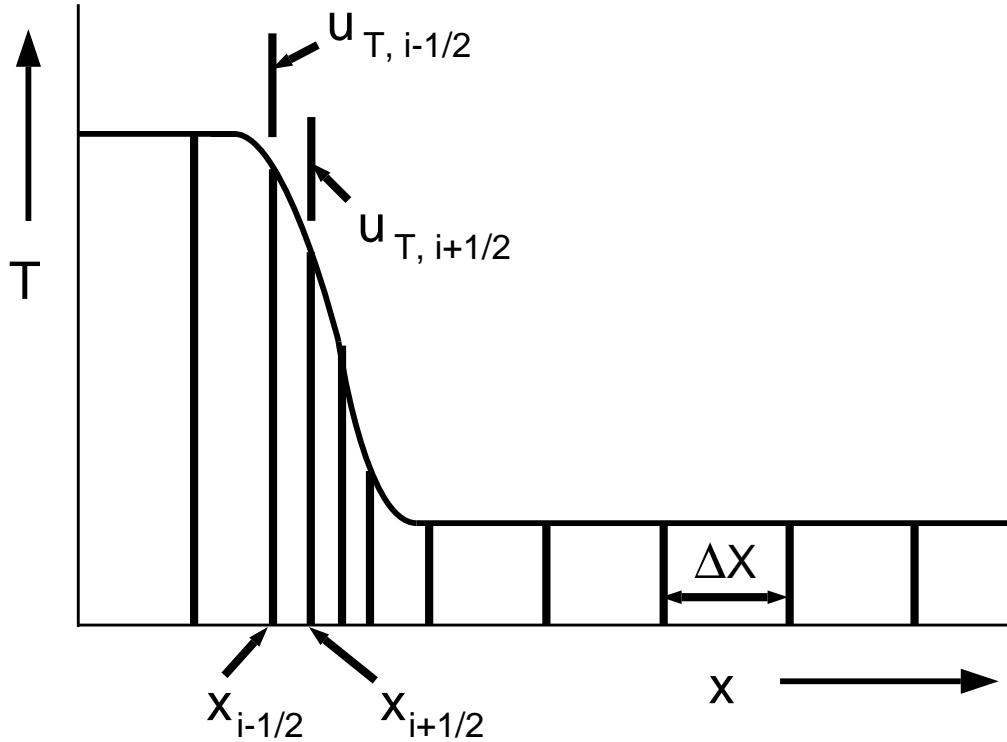


Abbildung 3.3: Temperaturprofil mit angepaßten Zellbreiten. Die Bogenlängen der Temperaturkurve in den einzelnen Zellintervallen werden durch den dynamischen Gitteradaptionsalgorithmus angeglichen.

Dorfi und Drury [35] stellen ein Verfahren vor, mit dem die Zellgrenzen in der gewünschten Art verschoben werden können. Sie gehen vom Prinzip gleicher Bogenlängen einer zu definierenden Kontrollfunktion, z.B. der Temperatur, in allen Zellen aus. Abbildung 3.3 zeigt beispielhaft die Position der Zellgrenzen, wenn der dargestellte Temperaturverlauf als Anpassungskriterium verwendet wird.

Mathematisch kann man die Gleichheit der Bogenlängen der Kontrollfunktion in jeder Zelle rekursiv formulieren:

$$\Delta x_i M_i - \Delta x_{i+1} M_{i+1} = 0 \tag{3.9}$$

wobei Δx_i und Δx_{i+1} die Zellbreiten der Zellen i und $i + 1$ sind. Damit der Term $\Delta x_i M_i$

die Bogenlänge des Temperaturverlaufs in der Zelle i repräsentiert, muß die im folgenden Monitorfunktion genannte Funktion M_i definiert werden als:

$$M_i = \sqrt{1 + G_i}, \quad G_i = \left(\frac{dT}{dx} \Big|_i \right)^2 \quad (3.10)$$

bzw. in diskretisierter Form:

$$G_i = \left(\frac{\Delta T_i}{\Delta x_i} \right)^2 \quad (3.11)$$

Dorfi und Drury [35] verallgemeinerten die Monitorfunktion M_i zu:

$$M_i = \sqrt{1 + G_i}, \quad G_i = \sum_j c_{j,i} \left(\frac{\Delta f_{j,i}}{\Delta x_i} \right)^2 \quad (3.12)$$

$\Delta f_{j,i}$ ist die Veränderung der Kontrollgröße in Zelle i , wobei j verdeutlicht, daß mehrere Größen (z.B. Temperatur, Druck, Massenbrüche) gemeinsam als Kriterium herangezogen werden können. Über $c_{j,i}$ können die einzelnen Kontrollgrößen zueinander in jeder Zelle separat gewichtet werden. G_i wird im folgenden als Gewichtungsfunktion bezeichnet.

Dorfi und Drury [35] limitierten darüberhinaus das Zellbreitenverhältnis zwischen benachbarten Zellen, die sogenannte Gitterverzerrung, indem sie statt der Gitterbreite eine Zelldichte n_i einführten:

$$n_i = \frac{1}{\Delta x_i} - \phi(\phi + 1) \left(\frac{1}{\Delta x_{i+1}} - 2\frac{1}{\Delta x_i} + \frac{1}{\Delta x_{i-1}} \right) \quad (3.13)$$

Dadurch limitiert der (positive) Parameter ϕ das Verhältnis zweier benachbarter Zellbreiten in folgender Weise:

$$\frac{\phi}{\phi + 1} \leq \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} \leq \frac{\phi + 1}{\phi} \quad (3.14)$$

Die zugehörige Gittergleichung lautet:

$$\frac{n_i}{M_i} = \frac{n_{i+1}}{M_{i+1}} \quad (3.15)$$

Im vorliegenden Fall führte diese Gittergleichung zu Konvergenzproblemen bei der numerischen Lösung. Deshalb wurde die Gitterbewegung mit Hilfe einer von Mack et al. [36] vorgeschlagenen Differentialgleichung verzögert:

$$\tau_g \left(\frac{dn_i}{dt} \frac{1}{M_i} - \frac{dn_{i+1}}{dt} \frac{1}{M_{i+1}} \right) + \frac{n_i}{M_i} - \frac{n_{i+1}}{M_{i+1}} = 0 \quad (3.16)$$

τ_g ist eine Verzögerungszeitkonstante. Wie bei Uphoff [32] erläutert, kann man sich die Zellwände durch Feder/Dämpfer-Elemente verbunden denken, die durch die starken Gradienten im Lösungsverlauf ausgelenkt werden. Die Bewegung der Zellwände wird durch die Feder/Dämpfer-Elemente verzögert.

Die von Dorfi und Drury [35] angegebene Gewichtungsfunktion G_i der Monitorfunktion M_i erwies sich in der oben angegebenen Form in Kombination mit dem in dieser Arbeit eingesetzten Fluß-Splitting-Verfahren als problematisch, da letzteres Unstetigkeiten mit möglichst wenig Punkten wiedergeben soll, während das adaptive Gitter gerade dort besonders viele Punkte konzentriert. Mit der unten angegebenen Gewichtungsfunktion G_i konnte die Gradientengewichtung im Bereich reiner Diskontinuitäten abgeschwächt werden, sodaß eine Punktkonzentration in ihnen vermieden werden konnte:

$$G_i = \sum_j c_j \frac{(\Delta f_{j,i})^2 + (\Delta f_{j,i+1})^2}{\max(\Delta x_i, \Delta x_{min})^2} \quad (3.17)$$

$$\text{mit } \Delta f_{j,i} = \frac{f_{j,i} - f_{j,i-1}}{\max(f_{j,i}, f_{j,i-1})} \quad \text{und} \quad \Delta f_{j,i+1} = \frac{f_{j,i+1} - f_{j,i}}{\max(f_{j,i+1}, f_{j,i})}$$

Als Kontrollgrößen $f_{j,i}$ zur Konstruktion der Gewichtungsfunktion G_i wurden in der vorliegenden Arbeit der Druck, die Gastemperatur und die Massenbrüche der Gaskomponenten verwendet.

3.3 Zeitliche Lösung

Das zu lösende Differentialgleichungssystem enthält zeitliche Ableitungen. Das System der Bilanzgleichungen (3.8)

$$\frac{\partial(\mathbf{q}_i \Delta x_i)}{\partial t} = -\mathbf{F}_{i+1/2}^{rel} + \mathbf{F}_{i-1/2}^{rel} + \mathbf{Q}_i \Delta x_i \quad (3.18)$$

läßt sich in der folgenden Form formal abgekürzt darstellen:

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) \quad (3.19)$$

\mathbf{y} ist der Vektor der Lösungsfunktionen, \mathbf{f} der Vektor der rechten Seiten. Der Punkt steht für die zeitliche Ableitung.

Ein einfaches Lösungsverfahren für solche Systeme ist das explizite Einschritt-Euler-Verfahren, in dem die Zeitintegration über ein ganzes zeitliches Integrationsintervall $\Delta t = t^{(n+1)} - t^{(n)}$ in einem Schritt ausgeführt wird und alle anderen Terme zum Zeitpunkt $t^{(n)}$

ausgewertet werden. Das diskretisierte System der Bilanzgleichungen lautet in diesem Fall:

$$\frac{\mathbf{y}^{(n+1)} - \mathbf{y}^{(n)}}{t^{(n+1)} - t^{(n)}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^{(n)}) \quad (3.20)$$

Die hochgestellten Indizes (n) und $(n+1)$ bezeichnen den alten und den zu berechnenden neuen Zeitpunkt. Es ist zu erkennen, daß die Gleichung einfach nach dem Lösungsvektor $\mathbf{y}^{(n+1)}$ aufgelöst und der Zustand zum neuen Zeitpunkt direkt berechnet werden kann. Dieses Verfahren hat den Nachteil, daß zugunsten der Konsistenz der Zeitschritt nach oben begrenzt werden muß. Er muß an der kleinsten im Bilanzgleichungssystem vorkommenden Zeitskala ausgerichtet werden. Dadurch würde der maximal zulässige Zeitschritt bei den hier untersuchten Systemen mit detaillierter Chemie sehr klein, was zu gewaltigen Rechenzeiten führen würde. Außerdem bliebe die Unsicherheit bestehen, ob der Integrationszeitschritt wirklich ausreichend klein gewählt worden ist.

Implizite Integrationsverfahren erfordern diese Zeitschrittfestlegung nicht. Das diskretisierte Gleichungssystem lautet in zeitlich impliziter Formulierung:

$$\frac{\mathbf{y}^{(n+1)} - \mathbf{y}^{(n)}}{t^{(n+1)} - t^{(n)}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^{(n+1)}) \quad (3.21)$$

Hier ist eine explizite Auflösung nach $\mathbf{y}^{(n+1)}$ nicht mehr möglich, da auch die rechte Seite vom zu berechnenden Zustand abhängt. Der Lösungsvektor $\mathbf{y}^{(n+1)}$ muß also z.B. iterativ bestimmt werden.

Bei den Gittergleichungen

$$\tau_g \left(\frac{dn_i}{dt} \frac{1}{M_i} - \frac{dn_{i+1}}{dt} \frac{1}{M_{i+1}} \right) + \frac{n_i}{M_i} - \frac{n_{i+1}}{M_{i+1}} = 0 \quad (3.22)$$

lassen sich die zeitlichen Ableitungen nicht entkoppeln, sodaß sie nicht in die Form $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ gebracht werden können. (Über die Zellkonzentrationen n_i hängt die Bewegungsgeschwindigkeit der Zellränder in einer Zelle i auch von den Bewegungsgeschwindigkeiten der Zellränder in den Nachbarzellen ab.) Eine formale Zusammenfassung der Bilanzgleichungen von Strömung und Chemie mit den Gittergleichungen führt deshalb zu einem Problem der Form:

$$\mathbf{g}_1(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) = \mathbf{g}_2(\mathbf{y}) \quad \text{oder} \quad \mathbf{g}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) = 0 \quad (3.23)$$

Aufgrund dieses Charakters des zu lösenden Problems und aufgrund der Vorteile impliziter Lösungsverfahren für den vorliegenden Fall wurde das Integrationsprogramm DASSL [37] herangezogen. Es ist für Systeme der Form

$$\mathbf{f}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}, t) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \dot{\mathbf{y}}(t_0) = \dot{\mathbf{y}}_0 \quad (3.24)$$

geeignet, wobei auch rein algebraische Gleichungen (ohne Zeitableitungen) zugelassen sind. Der Vektor der Anfangsbedingungen für die Zeitableitung, \dot{y}_0 , muß nicht zwingend vorgegeben werden, DASSL ist auch in der Lage, \dot{y}_0 zu berechnen, wenn zumindest der Vektor der Anfangsbedingungen y_0 vorgegeben wird. Die Funktionsweise von DASSL wird in Anhang E erläutert.