2.1 Teilprojekt D3

Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD–Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Arnd Meyer

Fakultät für Mathematik
Lehrstuhl für Numerische Analysis

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr.rer.nat.habil. Ulrich Groh
Dr.-Ing. Stefan Meinel
Dipl.-Math. Christoph Israel

Fakultät für Mathematik
Lehrstuhl für Numerische Analysis

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Im Projekt D3 steht das Ziel, schnelle parallele Algorithmen und Software zur Simulation komplexer Strömungs– und Transportvorgänge zu erarbeiten bzw. weiterzuentwickeln. Als Parallelisierungsprinzip kommt vorrangig eine Gebietszerlegung nach Prozessoren in Betracht, die durchgängig, d.h. von der Datenparallelisierung bis zur Konstruktion von Vorkonditionierungen für die zu lösenden linearen Gleichungssysteme, Anwendung findet. Unterstützung für die durchzuführenden Untersuchungen ist vor allem durch die Arbeiten zu Vorkonditionierungsmethoden im Teilprojekt A3 „Parallele Solver“ und durch die Ergebnisse des Teilprojektes D4 „Paralleles Pre- und Postprozessing“ gegeben.

Im Zentrum steht die Frage nach der Effizienz der angewendeten Parallelisierungstechnik insgesamt und der Effizienz und Robustheit der eingesetzten Solver für die Teilaufgaben unter den Bedingungen realitätsnaher Problemstellungen. Ausgangspunkt der Arbeit ist ein für den 2D–Fall bereits implementierter Algorithmus (siehe [MM93], [GMM94]). Diese Resultate sollen kritisch bewertet, weiterentwickelt und auf den wesentlich anspruchsvolleren 3D–Fall übertragen werden. Einen Schwerpunkt bildet dabei die Lösung der Druckkorrekturgleichung im Rahmen der Projektionsverfahren zur Berechnung inkompressibler Strömungen, die gegenüber den anderen Teilgleichungen einen überproportionalen Aufwand erfordert.

Für viele praktische Problemstellungen der Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen ist die Ausbildung scharfer, häufig beweglicher Grenzschichten typisch. Besonders bei der Behandlung von 3D-Problemen zeigt sich, daß diesem Phänomen mit sich gleichmäßig verfeinernden und damit fast uniformen Netzen völlig ungenügend Rechnung getragen wird. Selbst bei effektiver Lösung der linearen Systeme ist der Rechen- und Speicheraufwand durch das dramatische Anwachsen der Zahl der benötigten Knoten kaum beherrschbar.

Einen weiteren Schwerpunkt des Projektes stellt daher die Einbeziehung adaptiver Techniken der Netzgenerierung zur besseren Erfassung des Lösungsverhaltens dar. Aus Sicht der benutzten leistungsfähigen Multilevelvorkonditionierungen (hierarchische, BPX) erscheint der Einsatz eines hierarchischen Netzgenerators sinnvoll, der ungleichmäßige Elementhierarchien erzeugt, unter Duldung von sog. „hanging nodes“.

Adaptive Verfahren werfen eine Anzahl weiterer grundsätzlicher Fragen auf, deren Lösung als Voraussetzung für eine effiziente parallele Implementierung vorangetrieben werden muß. Diese betreffen vor allem die unvermeidbar entstehenden Disbalancen in der Auslastung der parallelen Prozessoren, deren Abbau nur durch erhebliche Datentransfers möglich ist. Es entsteht an dieser Stelle ein ernsthafter Widerspruch zwischen Adaption und Parallelität, dessen intelligente Lösung die praktischen Perspektiven der gesamten Herangehensweise mitbestimmt. Es stellen sich Fragen, wie: Wie ist ein Ausgleich der Lastverteilung zwischen den Prozessoren effizient zu organisieren? Welche Datenstrukturen eignen sich dafür? Wie sind in diesem Zusammenhang ungleichmäßig hierarchische Techniken der Netzgenerierung mit irregulären Knoten gegenüber den klassischen Verfeinerungstechniken zu bewerten?

Offensichtlich geht eine umfassende Untersuchung dieser Aspekte weit über den Rahmen des hier abzurechnenden Projektes hinaus und wird auch Gegenstand weiterer Arbeiten sein müssen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Entsprechend den unter Punkt 2 dargelegten Aufgabenstellungen zerfällt die Projektarbeit in zwei Teilaufgaben, die vorübergehend eine gewisse Selbständigkeit der Bearbeitung aufweisen.

Die damit einhergehende Zersplitterung der Bearbeitungskapazität wurde in Kauf genommen, da es als unerläßlich angesehen wurde, sowohl die Aspekte der Algorithmus- und Programmentwicklung, als auch die Untersuchungen zu adaptiven Verfahren in dieser Phase der Bearbeitung voranzutreiben.

Der erreichte Bearbeitungsstand schafft notwendige Voraussetzungen, um in der folgenden Antragsphase die adaptiven Verfahren in die 2D- und 3D- Simulationsprogrammen einzubauen und zu untersuchen.

Die Breite der berührten Aufgabenpalette bedingte andererseits eine Konzentration der Untersuchungen auf Teilaspekte, die als vorrangig eingeschätzt wurden.
Die Publikationstätigkeit ist zugunsten der Bearbeitung und Fertigstellung wichtiger Teilleistungen zunchst zurückgestellt worden.

2.3.1 Teilaufgabe Algorithmus und Experimentalprogramm zur Simulation gekoppelter Strömungs- und Transportvorgänge

2.3.1.1 Experimentalprogramm für 3D-Simulation

Einen Schwerpunkt der Arbeit stellte die Erarbeitung eines neuen Programmsystems zur Simulation von dreidimensionalen Strömungs- und Transportprozessen dar.
Ein erheblicher Zeitanteil wurde von der Implementierung und Testung neuer Programmteile in Anspruch genommen. Die Entwicklung orientierte sich in den Fragen der Aufgabenklasse, der interaktiven Oberfläche und des grundsätzlichen numerischen Verfahrens am vorhandenen 2D-System. In zahlreichen Einzelfragestellungen mußten jedoch spezifisch für die 3D-Problematik neue Lösungen gefunden werden. Der vorliegende Programmodul macht Gebrauch von Routinen der Netzgenerierung und grafischen Ergebnisdarstellung, die in den Teilprojekten A3 und D4 entstanden sind. Hinsichtlich der Datenkommunikation wird die Schnittstelle zu den vorhandenen Bibliotheken genutzt und somit die Lauffähigkeit auf verschiedenen Plattformen sichergestellt.
Die Anwendung des Programmsystems auf komplexere Problemstellungen blieb bisher auf einige wenige Beispiele beschränkt. Neben der Untersuchung einer rotierenden Strömung in einem zylindrischen Gefäß wurden vor allem erste Testrechnungen für den 3D-Strömungsbenchmark des DFG-Schwerpunktprogrammes „Strömungssimulation auf Hochleistungsrechnern" durchgeführt.

2.3.1.2 Untersuchungen zur Modifizierung des Projektionsverfahrens

Die Frage nach der Vervollkommnung der numerischen Algorithmen, unter Berücksichtigung bestimmter Kriterien (Approximation, Robustheit, Effektivität, Parallelisierbarkeit) begleitet ständig die Arbeit am Projekt.
Die konkrete Wahl der numerischen Ansätze für die Diskretisierung, Linerarisierung, Stabilisierung und Entkopplung der untersuchten komplexen Aufgabenstellung eröffnet ein breites Spektrum von Realisierungsvarianten.
Eine besonders wichtige Komponente im verwendeten Algorithmus stellt das semiimplizite Projektionsverfahren für die Lösung des Strömungsproblemes dar. Es wurden Modifikationen dieses Verfahrens betrachtet, um bekannte bzw. durch Anwendungsrechnungen aufgedeckte Schwächen im Bereich der Zeitdiskretisierung und der Konvergenz des Projektionsschrittes zu analysieren. Im Ergebnis der Untersuchungen stehen Aussagen zur Möglichkeit einer Zeitdiskretisierung mit $O(\Delta t^2)$ Genauigkeit und Erkenntnisse über die Konvergenz eines iterativen Projektionsverfahrens.

2.3.1.3 Zur Erweiterung der physikalischen Aufgabenklasse

Eine grundlegende Zielstellung der zur Diskussion stehenden Forschungsarbeit ist die Ausrichtung der Algorithmen- und Programmentwicklung auf eine anwendungsrelevante Aufgabenklasse. Durch die Hinwendung zu Vorgängen, die auch mit erheblichen Temperaturdifferenzen und Änderungen der stofflichen Zusammensetzung in den betrachteten Medien einhergehen, stellte sich die Frage nach der adäquaten Berücksichtigung einer veränderlichen Dichte. Es zeigt sich, daß dieser Effekt in die Modellierung wie auch in den Algorithmus integriert werden kann, ohne die grundsätzliche Abgrenzung zu den kompressiblen Vorgängen und Verfahren aufzugeben.

2.3.2 Teilaufgabe Adaptive FEM auf irregulären hierarchischen Netzen

Bei der adaptiven FEM sind zur Anpassung des Netzes an die Lösung solche Techniken der Netzverfeinerung oder -vergröberung weit verbreitet, die die Regularität des Netzes bewahren. Eine Übersicht über bekannte Verfeinerungstechniken für Dreiecksnetze, mit denen die Netzregularität gewahrt werden kann, gibt Verfürth [Ver93]. Irreguläre Netze ergeben sich, wenn Eckknoten von Elementen auf dem Rand anderer Elemente liegen, ohne dort Eckknoten zu sein (irreguläre Knoten, hanging nodes).

Die modernen Multilevel-Vorkonditionierungen zur iterativen Lösung der FEM-Gleichungssysteme (z.B. die hierarchische Vorkonditionierung nach Yserentant [Ys86], BPX-Vorkonditionierung [BPX90], Multigrid-Techniken) sind auf hierarchische Netzstrukturen angewiesen. Für adaptive Verfahren mit derartigen Vorkonditionierern ist daher die Nutzung solcher Algorithmen wünschenswert, bei denen die Verfeinerung aller Elemente nach dem gleichen Schema erfolgt, unabhängig von den übrigen Elementen. Die Vorteile bestehen in der Einfachheit, Schnelligkeit und Lokalität (und damit einfachen Parallelisierbarkeit) der Verfeinerungsalgorithmen sowie der einfachen Rekonstruierbarkeit von Elementen bei Netzvergröberung. Außerdem könnten entsprechende Räume von Ansatzfunktionen bei Netzverfeinerung eine monoton wachsende Folge im Sinne der Mengeneinschließung bilden, eine Eigenschaft, die zumindest für theoretische Untersuchungen nützlich ist, vgl. etwa Oswald [Osw94]. Diese Art von Verfeinerungsalgorithmen führt jedoch zwangsläufig zum Entstehen von irregulären Knoten und wurde deshalb im Rahmen der konformen FEM als selbständige Technik der ungleichmäßigen Verfeinerung zunächst kaum eingesetzt. Multilevel-Löser in der FEM benutzen oft gleichmäßig über einem Grobnetz erzeugte Netzhierarchien oder ungleichmäßige hierarchische Netzstrukturen, bei denen durch zusätzliche Abschließungsoperationen der zunächst durch irreguläre Knoten gestörte reguläre Charakter des Netzes wiederhergestellt wird, vgl. zum Beispiel Leinen [Lei90], Rüde [Rue93]. Die Abschließungsalgorithmen stellen zum einen einen zusätzlichen Aufwand dar und tragen zum anderen globalen Charakter, was bei Parallelverarbeitung zu zusätzlichen Kommunikationen führt. Ist die Netzabschließung nur temporärer Natur, wird auch die Monotonie der Folge der FE-Räume verletzt.

Der alternative Weg, die irregulären Knoten zu akzeptieren und FEM-Schemata auf irregulären Netzen zu realisieren, fand in der letzten Zeit jedoch zunehmend Interesse. Becker und Rannacher zum Beispiel erlauben in [Bec95], [BR96] im Zusammenhang mit dort untersuchten adaptiven 2D-Techniken einen irregulären Knoten auf der Elementkante, der keinem zusätzlichen Freiheitsgrad der zu berechnenden FEM-Lösung entspricht. Der entsprechende Wert der FEM-Lösung wird aus den beiden regulären Nachbarknoten interpoliert und im Lösungsprozeß ggf. eliminiert. Dies steht auch für das Vorgehen anderer Autoren in älteren Arbeiten, ist jedoch nicht rein lokal realisierbar und damit für die Parallelisierung nicht ideal.

Im Ergebnis der Untersuchungen wird eine parallele adaptive FEM systematisch entwickelt bzw. ausgebaut, welche auf den hierarchischen Netzen mit irregulären Knoten arbeitet, jedoch weitergehende Freiheiten bei der Netzverfeinerung erlaubt als obige Vorgehensweise mit einem irregulären Knoten zwischen zwei regulären. Anstelle der elementorientierten Netzverfeinerung wird eine kantenorientierte Basiserweiterung auf Graphen zum Ausgangspunkt genommen werden, wobei die Entscheidung über die Hinzunahme einer neuen Basisfunktion als lokale Entscheidung auf der Netzkante ohne nachfolgende „Bereinigungsarbeiten" zu fällen ist als Voraussetzung für eine hohe Parallelität. Es werden zunächst nur Dreiecksnetze betrachtet, die wesentlichen Überlegungen lassen sich jedoch leicht auf andere 2D- und 3D-Netze übertragen.

Eine erste Version des Konzeptes ([Gro95a], [Gro95b]) war zunächst auf der Grundlage einschränkender Annahmen über die Netzverfeinerung entwickelt worden. Sie enthält jedoch detaillierte Überlegungen zu den verwendeten hierarchischen Datenstrukturen, ihrer Verwaltung sowie zu den Algorithmen der Netzänderung.
Im Mittelpunkt des vorgestellten Arbeitsabschnittes steht die systematische Begründung des FEM-Konzeptes, von der Erklärung zulässiger ungleichmäßiger hierarchischer Basen, deren Beschreibung und Veränderung im Rahmen ungleichmäßiger hierarchischer Netze als zugeordneter Informatiosstruktur, über die Erklärung äquivalenter FE-Basen, zugeordneter FEM-Schemata (zunächst für ein elliptisches Problem zweiter Ordnung) bis hin zur vorkonditionierten iterativen numerischen Lösung der FEM-Gleichungssysteme, abgehandelt am hierarchisch und BPX-vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten.
Den zweiten Schwerpunkt bildet die Entwicklung eines adaptiven Algorithmus unter Verwendung dieser Technik mit besonderer Betonung einer effektiven Parallelisierung auf MIMD-Parallelrechnern.

Literaturverzeichnis zu 2.3/(eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

[Apel95] T. Apel
SPC-PMPo3D - Users Manual
Preprint SPC 95/33, TU Chemnitz, 1995

[Bec95] R. Becker
An Adaptive Finite Element Method for the Incompressible Navier-Stokes Equations on Time-dependent Domains.
Preprint 95-44 des SFB 359 „Reaktive Strömungen, Diffusion und Transport" an der Universität Heidelberg, 1995.

[BR96] R. Becker, R. Rannacher
Weighted A Posteriori Error Control in FE Methods.
Preprint 96-1 des SFB 359 an der Universität Heidelberg, 1996.

[BPX90] J.H. Bramble, J.E. Paciak, J. Xu
Parallel multilevel preconditioners
Math. Comp., Vol. 55, No. 191:1-22, 1990

[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.

[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.

[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.

[Gro94] U. Groh
Lokale Realisierung von Vektoroperationen auf Parallelrechnern.
Preprint SPC 94_2, Techn. Univ. Chemnitz 1994.

[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.

[HLM93] 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, Teubner–Verlag, Stuttgart 1993.

[Hac86] W. Hackbusch
Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen
B. G. Teubner, 1986

[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

[Lei90] P. Leinen
Ein schneller adaptiver Löser für elliptische Randwertprobleme auf Seriell- und Parallelrechnern.
Dissertation, Universität Dortmund, 1990.

[Mei94] 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.

[Mey90] A. Meyer
A parallel preconditioned conjugate gradient method using domain decomposition and inexact solvers on each subdomain.
Computing, 45:217-234, 1990 .

[Mey94a] A. Meyer
The Concept of Special Inner Products for Deriving New Conjugate Gradient-like Solvers for Non-symmetric Sparse Linear Systems.
Num. Lin. Alg. Appl. 1(2), 129-139, 1994

[Mey94b] A. Meyer
Preconditioning the Pseudo-Laplacian for Finite Element Simulation of Incompressible Flow.
Preprint SPC 94_19, Preprint–Reihe der Chemnitzer DFG-Forschergruppe „Scientific Parallel Computing", 1994.

[Osw94] P. Oswald
Multilevel Finite Element Approximation: Theory and Applications.
Teubner, Stuttgart, 1994.

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

[Rue93] U. Rüde
Mathematical and Computational Techniques for Multilevel Adaptive Methods.
Series: Frontiers in Applied Mathematics, Vol. 13, SIAM, Philadelphia, 1993.

[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.

[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

[Ver93] R. Verfürth
A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques.
Report, Inst. f. Angew. Mathem., Univ. Zürich, 1993

[Ys86] H. Yserentant
On the multilevel-splitting of finite element spaces.
Numer. Math., 49: 379–412, 1986

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Algorithmus und Experimentalprogramm ...

2.4.1.1 Experimentalprogramm für 3D-Simulation

Die Erarbeitung eines Moduls für die 3D-Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen stellte inhaltlich einen Schwerpunkt der durchgeführten Arbeiten dar. Hierbei wurde das Ziel erreicht, ein Programmpaket zu schaffen, das grundsätzlich die gleiche Funktionalität wie die Variante für ebene und rotationssymmetrische Aufgaben (CF2D) besitzt.
Folgende Merkmale des 3D-Modules CF3D stimmen im wesentlichen mit der 2D-Variante überein:

- Betrachtete Aufgabenklasse: Instationäre Strömungs- und Transportvorgänge
- Interaktive Progammoberfläche mit Möglichkeiten zur Steuerung und grafischen Ergebniskontrolle
- Parallelisierungskonzept: Gebietszerlegung
- Finite Elemente Technik mit linearen (bi-, trilinearen) Elementen, wobei der Druck auf einem gröberen Gitter approximiert wird

- Semiimplizites Druckiterationsverfahren für die Behandlung der Navier - Stokes - Gleichung

- Implizite Zeitintegration für Transportgleichungen, SUPG- bzw. streamline diffusion - Verfahren zur Behandlung von konvektiv dominanten Problemen

- Vorkonditionierte CG-Verfahren zur parallelen Lösung der linearen Gleichungssysteme

Neben den gewollten Analogien zwischen 2D- und 3D-Simulation existiert jedoch eine Reihe von Teilproblemen, die spezifische Überlegungen im 3D-Fall erforderlich machten. Hierzu zählen z.B. Aspekte des Prä- und Postprozessing, der Netzgenerierung, der Elementroutinen, der Kommunikationsalgorithmen und der hierarchischen Vorkonditionierungstechniken.
Die Routinen zur Elementgenerierung, die neu implementiert wurden, sind ebenso wie die Unterprogramme zur Steuerung des Algorithmus in entsprechenden neuen Bibliotheken zusammengefaßt.
Im folgenden wird zu einigen ausgewählten Fragen ausführlicher berichtet.
Bezüglich der Problemklasse, der grundsätzlichen numerischen Herangehensweise und den damit zusammenhängenden Bezeichnungen sei auf ([GMM94],[GIMM94]) sowie auf die Abschnitte (2.4.1.2) und (2.4.1.3) verwiesen.

Netzgenerierung, Präprozessing
Bei Generierung von räumlichen FEM-Netzen konnten Ergebnisse der Teilprojekte A3 ([Apel95]) und D4 genutzt werden. Dies betrifft vor allem die Struktur der 3D-Eingabefiles und deren Verarbeitung, die Verteilung der Daten auf die Prozessoren, die parallele Netzverfeinerung sowie die Erzeugung von Hierarchie- und Kommunikationsinformationen. Der Netzverfeinerungsmodul ist in der Lage Hexaeder und Tetraeder zu verarbeiten; die vom praktischen Gesichtspunkt ebenfalls interessanten Pentaeder stehen z.Z. nicht zur Verfügung.
Unter der Bedingung, daß eine *gleichmäßige* Verfeinerung des Netzes erfolgt, kommt den Algorithmen zur Generierung von Grobnetzen eine große Bedeutung zu. Es zeigte sich, daß Netze, die nur an den geometrischen Gegebenheiten orientiert werden, vielfach keine akzeptable Approximation von Strömungsproblemen zulassen. Benötigt wird ein Grobnetzgenerator, der eine Präadaption des Grobnetzes an vorhersehbare Lösungseigenschaften erlaubt. Zur Gewinnung geeigneter Grobnetze für komplexere Problemstellungen werden daher vorest halbempirische Methoden angewendet.
Die Vielfalt der bei einer Simulation praxisnaher Aufgaben benötigten Eingabedaten und -informationen (z.B. Stoffdaten, Beschreibung von Quellgliedern, Randvorgaben, Anfangswerte) können in einem die Geometrie beschreibenden Eingabefile nicht untergebracht werden. Hierzu erschien es sinnvoll, problemspezifische Routinen vorzusehen, die im lauffähigen Programm eine Anzahl von Varianten und von Datensätzen bereitstellen, und deren Zuordnung zur aktuell untersuchten Problemstellung interaktiv erfolgt. Diese Konzeption trägt sehr zur Flexibilität des Simulationsprogrammes bei, allerdings ist bei Bearbeitung eines neuen völlig Anwendungsproblems meist auch eine Korrektur und Übersetzung der entsprechenden

Bibliothek erforderlich.

3D Postprozessing
Wie bereits bei der Arbeit mit dem 2D-Programmsystem erweist sich die Möglichkeit einer schnellen grafischen Ergebniskontrolle als unverzichtbares Werkzeug für die Programmentwicklung, -testung und Durchführung von numerischen Experimenten.
Um die Eigenschaften des bereits entwickelten leistungsfähigen 2D-Grafikmoduls (s. Teilprojekt D4) in dreidimensionalen Gebieten nutzbar zu machen, bedurfte es eines Algorithmus zur Datenaufbereitung in ebenen Schnitten eines räumlichen FEM-Netzes. Ein entsprechendes Adaptionsprogramm, das in einem frei wählbaren 2D-Schnitt des Lösungsgebietes Ω ein Hilfsnetz konstruiert und die FEM-Daten auf dieses Netz abbildet, wurde in Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt D4 ausgearbeitet und implementiert.

Datenkommunikation
Die Datenkommunikation zwischen den Prozessoren eines Parallelrechners ist bei räumlichen Aufgaben deutlich kritischer als bei vergleichbaren ebenen Problemstellungen. Zum einen nimmt der Umfang der zu kommunizierenden Daten erheblich zu. Dies zeigt bereits ein einfacher Vergleich zwischen einem rechteckigen Gebiet mit 401*401=160801 Knoten und einem quaderförmigen Gebiet mit 55*54*54= 160380 Knoten:
Werden beide Gebiete auf jeweils 64 Prozessoren in optimaler Weise verteilt, so ergeben sich beim Rechteckgebiet 5565 Knoten des Koppelrandes, das Quadergebiet weist dagegen 24150 Koppelknoten auf.
Neben der Datenmenge ist auch die Struktur der zu kommunizierenden Daten komplizierter, da für die Flächen, Kanten und Ecken drei verschiedene Kommunikationswege in Betracht zu ziehen sind.
Unter den genannten Prämissen kommt der Optimierung der Datenkommunikation eine erhöhte Bedeutung zu. Folgende Einflußmöglichkeiten stehen im Rahmen des Parallelisierungskonzeptes zur Verfügung:

- Verringerung der Anzahl der notwendigen Kommunikationen
- Optimierung der Koppelrandkommunikation
- Minimierung der Anzahl der Koppelrandpunkte durch optimale Verteilung des Grobnetzes

Die Anzahl der im Algorithmus notwendigen Kommunikationen wird hauptsächlich durch die Iterationszahl bei der Lösung der linearen Gleichungssysteme bestimmt, siehe hierzu den Abschnitt „Vorkonditionierungstechniken“.
Bei der (für die Gebietszerlegungsmethode typischen) Koppelrandkommunikation sind die Randdaten von knotenbezogenen Feldern auszutauschen, wobei die Daten auf Flächen zwischen jeweils zwei Prozessoren, die Kanten- und Eckpunktdaten zwischen mehreren Prozessoren zu kommunizieren sind. Es stellt sich eine komplexe Optimierungsaufgabe zur Balancierung von Speicherzugriffen, start-up-Zeiten und redundanten Datentransfers, deren Lösung auch von Hardwareeigenschaften

und von der Kommunikationsschnittstelle abhängt. Die vorliegenden Erfahrungen zeigen, daß in dieser Frage eine enge Verflechtung der Untersuchung wirklich kritischer Anwendungsprobleme und der hardwarenahen Entwicklung von Kommunikationswerkzeugen bestehen muß. Im Teilprojekt B2 wurden Testrechnungen mit dem Strömungssimulationsprogramm für die Untersuchung neuer Kommunikationsschnittstellen herangezogen. Es erscheint uns wichtig, daß die Zusammenarbeit mit dem Projektbereich B ausgebaut wird.
Die zur Zeit verfügbaren Routinen zur Koppelrandkommunikation sind in einer Bibliothek (DDCMCOM) abgelegt. Für die vorliegenden Simulationsaufgaben erwies es sich als notwendig, eine Erweiterung der Kommunikationsroutinen für den gleichzeitigen Datenaustausch von mehreren Variablenfeldern vorzunehmen.
Die optimale Verteilung des Grobnetzes auf die Prozessortopologie stellt vor allem für komplexe Aufgaben mit umfangreichem Grobnetz eine anspruchsvolle Aufgabe dar. Über entsprechende Lösungsansätze wird im Teilprojekt A3 berichtet.
Ein Beispiel soll die Auswirkung verschiedener Verteilungsstrategien auf die erforderliche Rechenzeit dokumentieren.
In Tabelle (2.1) sind für drei verschiedene Verteilungsvarianten des Grobnetzes die CPU-Zeiten für einen Zeitschritt einer räumlichen Zylinderumströmung angegeben. Es handelt sich um ein Netz mit 49980 Knoten, das auf 4,8,16 Prozessoren des Parallelrechners GC PowerPlus bearbeitet wurde. Die Verteilungsvarianten des Grobnetzes (700 Elemente) sind für 16 Prozessoren in Bild (2.1) veranschaulicht.

			CPU - Zeiten (in s)			
Vert.-Var.	Proz.		Assembl.	CG v	CG p	Gesamt
blind	4		49.8	41.2	274.9	370.7
coord	4		49.9	16.3	77.2	145.6
spect	4		49.9	12.1	44.7	108.4
blind	8		24.5	21.3	135.8	184.3
coord	8		24.5	12.7	74.5	113.4
spect	8		24.4	7.8	29.3	62.5
blind	16		12.7	15.8	94.4	125.0
coord	16		12.7	10.4	57.7	82.4
spect	16		12.7	5.8	19.3	38.6

Tabelle 2.1: CPU-Zeiten für einen Zeitschritt einer Strömungssimulation bei verschiedenen Verteilungsvarianten des Grobnetzes

Die verwendeten Abkürzungen bedeuten:

„**blind**“: Verteilung auf der Basis der (zufälligen geschichteten) Anordnung der Elemente im Eingabefile
„**coord**“: Verteilung durch Koordinatenbisektion
„**spect**“: Verteilung durch speziellen spektralen Bisektionsalgorithmus

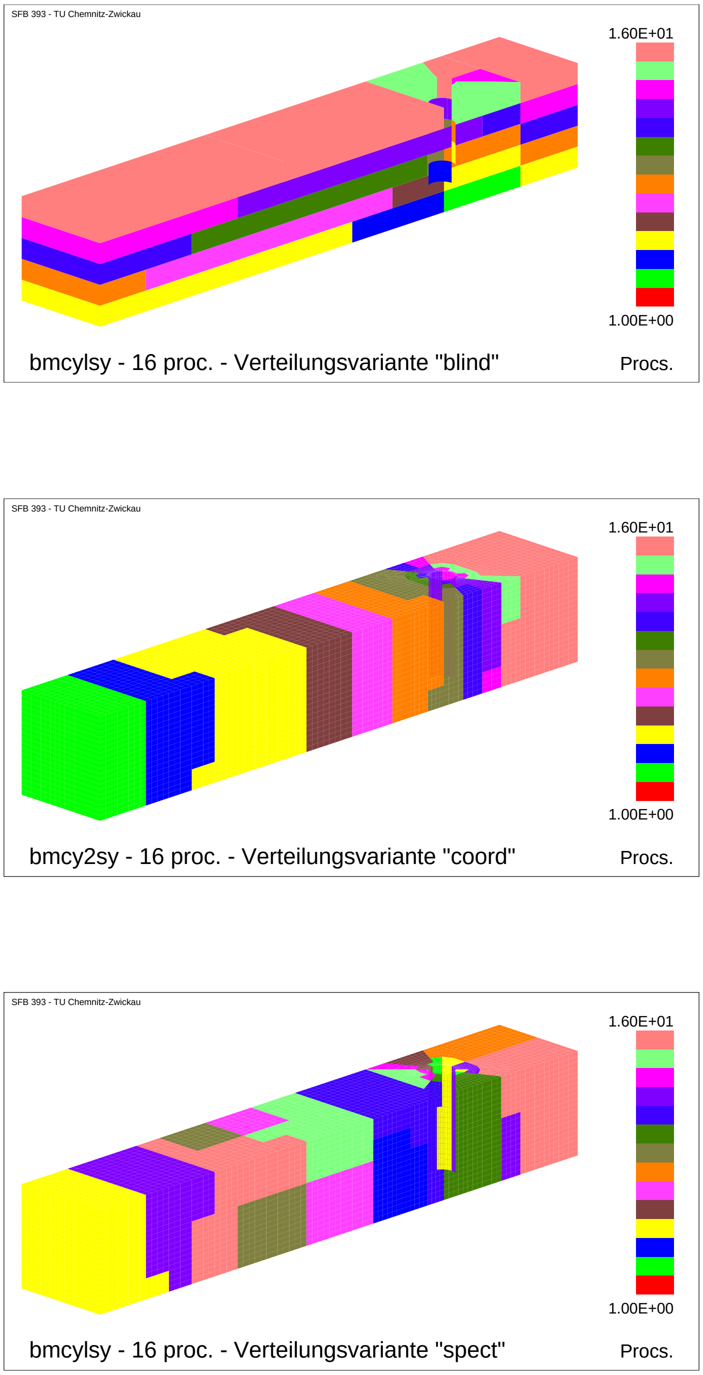


Abbildung 2.1: Verteilungsvarianten der Elemente (Grobnetz: 700 Elemente) auf 16 Prozessoren

Der Vergleich zeigt drastisch den großen Einfluß der Elementverteilung auf die Effizienz der parallelen Simulation. Gleichzeitig macht das Beispiel deutlich, daß die Fragen der Kommunikation in Hinblick auf noch komplexere Gebiete/Grobnetze, eine höhere Prozessoranzahl und ggf. adaptive Vernetzungsstrategien weiter intensiv untersucht werden müssen.

Datenstruktur und Speicherverwaltung
Die Untersuchung von realitätsnahen räumlichen Aufgabenstellungen konfrontiert den Bearbeiter mit ernsten Problemen in bezug auf die Hauptspeicherressourcen. Eine einfache Betrachtung zum Verbrauch an Speicherplatz zeigt, daß bereits die dreimalige gleichmäßige Verfeinerung **eines** Grobnetzelementes (Hexaeder), die entsprechend der zugrunde liegenden Parallelisierungsidee auf einem Prozessor stattfindet, zu folgender Datenstruktur führt:

- 512 Elemente
- 4912 Knoten
- 183843 Nichtnullelemente in (blockdiagonaler) viskoser Matrix
- 61281 Nichtnullelemente in der Massenmatrix
- 206763 Nichtnullelemente in der Gradientenmatrix $\bar{\mathbf{B}}$
- 117649 Nichtnullelemente in einer(!) unsymmetrischen Matrix
- n*4913 Elemente in diversen Vektoren, $n \sim 10...20$

Grob überschlagen beanspruchen diese Felder in doppeltgenauer Darstellung 5 bis 6 MB Speicherplatz. Eine nochmalige Verfeinerung des Netzes erhöht diesen Bedarf etwa um den Faktor 8 und kann daher auf einem Doppel-Prozessor des eingesetzten Parallelrechnersytems GC PowerPlus (32 MB Hauptspeicher) nicht mehr bearbeitet werden. Die betrachtete dreifache Verfeinerung erzeugt andererseits nur 17 Knoten pro Raumrichtung, was u.U. keine ausreichende Diskretisierung darstellt. Typischerweise enthält ein Grobnetz für realistische 3D-Probleme $O(10^3)$ Elemente, so daß pro Prozessor etwa 10...100 Grobnetzelemente zu verarbeiten sind.
Aus den obigen Überlegungen leiten sich die folgenden (nicht neuen) grundsätzlichen Schlußfolgerungen ab:

- Für sinnvolle 3D-Simulationsrechnungen sollte der Rechner über ausreichend Hauptspeicherplatz verfügen, als *Mindestanforderung* muß summarisch etwa von 1 GB ausgegangen werden.
- Zur Untersuchung von Vorgängen in komplizierten Lösungsgebieten oder/und mit lokal stark schwankenden Lösungsgradienten kann auf die Techniken der *adaptiven Netzverfeinerung* nicht verzichtet werden.

Darüberhinaus gilt, daß programmtechnisch und algorithmisch ein sparsamer Umgang mit Speicherplatz, insbesondere in bezug auf die Matrizen, erforderlich ist.

Diesem Anliegen wird mit der Kompaktspeicherung der FEM-Matrizen bereits in starkem Maße Rechnung getragen.
Ein gewisses Problem im 3D-Fall stellte jedoch die Initialisierung der Struktur der benötigten Kompaktmatrizen dar. (Unter „Struktur“ wird dabei insbesondere ein Leitvektor, bestehend aus Zeigern auf die Zeilenenden, verstanden.) :
Die vorher übliche Vorgehensweise, zunächst in *allen* Zeilen den (abschätzbaren) maximal benötigten Platz bereitzustellen, die Matrizen zu assemblieren und dann zu verdichten, scheiterte in einigen Fällen, da dieser Prozess temporär sehr viel Speicherplatz beansprucht. Die konsequente Umkehrung dieser Strategie, von einer Diagonalmatrix auszugehen und bei jedem neu assemblierten Element durch Umspeicherung Platz zu schaffen, erweist sich als zu rechenzeitintensiv.
Die Lösung des Problems liegt in der Vorgabe einer Matrix mit geeignet gewählter Zeilenlänge. Bei der initialen Assemblierung ist in vertretbarem Umfang Umspeicherung erforderlich. Abschließend erfolgt eine Verdichtung der Struktur. Dieser Prozess wird nur für die beiden möglich Strukturtypen (Massenmatrix, Gradientenmatrix) durchgeführt, alle weiteren benötigten Matrixstrukturen werden aus diesen abgeleitet.
Im allgemeinen Falle (veränderliche Viskosität) ist die Diskretisierung des viskosen Gliedes der Impulsgleichung eine (symmetrische) Blockmatrix mit $3 * 3$ Blöcken und stellt damit ein Schwergewicht bei der Speicherbelegung dar. Im obigen Beispiel würde diese Matrix insgesamt 536790 Nichtnullen aufweisen. Auf die Assemblierung der zusätzlichen Nebendiagonalblöcke kann verzichtet werden, wenn die entsprechenden Anteile des Operators explizit, d.h. auf der rechten Seite der Impulsgleichung verarbeitet werden.

Elementroutinen
Als Elementgeometrien sind Tetraeder, Pentaeder und Hexaeder zugelassen und implementiert. Da Pentaederelemente z.Z. durch die Netzgenerierung nicht unterstützt werden, liegen keine Ergebnisse für diesem Elementtyp vor.
Die Assemblierung der Elementmatrizen erfolgt für 10-, 18- bzw. 27-Knoten-Elemente, die intern in jeweils acht Teilelemente zerlegt werden. Entsprechend der Wahl des Druck-Geschwindigkeits-Ansatzes werden ausschließlich lineare, bilineare bzw. trilineare Formfunktionen verwendet. Die Druckfreiheitsgrade sind dabei nur in den Eckknoten der Elemente, die Freiheitsgrade der übrigen Funktionen sind auf allen Knoten definiert.
Alle elementaren Generierungsroutinen arbeiten auf der Ebene der Teilelemente (mit 4,6,8 Knoten), und es erfolgt eine Assemblierung der Teilelementmatrizen in die eigentliche Elementmatrix. Im Rahmen dieses Teilassemblierungsschrittes wird auch die Gradientenmatrix $\bar{\mathbf{B}}$ erzeugt, die sowohl von den Ansatzfunktionen des Druckes (im Gesamtelement) als auch von denen der Geschwindigkeit (in den Teilelementen) abhängt.
Bei der Generierung der Elementmatrizen ist eine erhebliche Anzahl von Informationen über die Aufgabenstellung und das numerische Verfahren zu berücksichtigen, die vom Nutzer eingegeben oder verfahrensabhängig erzeugt werden. Die Verarbeitung dieser Informationen zur Steuerung der Elementberechnung erfolgt in einer sehr komplexen Routine, die bei jedem Teilelement durchlaufen wird. Un-

ter Verzicht auf einen Teil der Flexibilität des Systems kann an dieser Stelle durch vereinfachte Spezialroutinen noch Effektivität gewonnen werden.
Durch die Wahl der Elementepaarung sind Fragen des Rechen- und Speicheraufwandes bei der Assemblierung und Verarbeitung der FEM-Matrizen weitgehend vorbestimmt. Die von uns verwendeten Elementräume zeichnen sich durch sehr einfache Ansatzfunktionen für alle Variablen aus, die Besetztheit der assemblierten Matrizen ist jedoch relativ hoch. Prinzipiell wirkt sich dies ungünstig auf die erforderliche CPU-Zeit zur Berechnung, Assemblierung und zur Ausführung von Matrix-Vektor-Multiplikationen aus. Wie der Vergleich zwischen Tetraeder- und Hexaederelementen jedoch zeigt, spielen solche Effekte, wie die Lokalität der Daten (Cachezugriffe) und (beim Parallelrechner) die Kommunikationszeiten ebenfalls eine entscheidende Rolle. Trotz deutlich geringerer Besetztheit der globalen Matrizen sind bei Tetraederelementen kaum Rechenzeitvorteile bei der Assemblierung und Verarbeitung der Matrizen sichtbar.
Durch eine außerordentlich niedrige Anzahl von Einträgen in den Matrizen zeichnen sich die Elementpaarungen mit elementweise konstantem Druck und unstetiger (bi-,tri-) linearer Geschwindigkeit aus ([Tur97]). Die Anwendung dieser Elemente hat jedoch weitreichende Konsequenzen für den numerischen Algorithmus und die verwendete Parallelisierungsstrategie (Netzgenerierung, Elementroutinen, hierarchische Strukturen, Änderung der zu kommunizierenden Datenstrukturen zwischen den Teilgebieten), so daß eine Einbeziehung in die laufenden Untersuchungen bisher nicht möglich war.

Vorkonditionierungstechniken
Zur Auflösung der linearen Gleichungssyteme für die Geschwindigkeit, die Druckkorrektur und für ggf. hinzutretende Transportgrößen werden, wie im 2D-Fall, parallele vorkonditionierte CG-Verfahren eingesetzt.
Die im 2D-Algorithmus verwendeten hierarchischen Vorkonditionierungstechniken nach Yserentant werden durch Varianten der BPX-Vorkonditionierung ([BPX90]) ersetzt. Begründet ist dies durch die Asymptotik von Normabschätzungen für die Vorkonditionierungsoperatoren, die im Dreidimensionalen eindeutig für die Anwendung des BPX spricht (siehe hierzu Teilprojekt A3).
Von zentraler Bedeutung für den Gesamtaufwand an Rechenzeit ist die Realisierung des Druckkorrekturschrittes. In jedem Zeitschritt ist mindestens einmal die Lösung eines Gleichungssystems mit einer symmetrischen Matrix $\mathcal{K}$ erforderlich (2.1). Der diskrete Operator $\mathcal{K}$ ist dabei spektral äquivalent zum diskreten Laplacian ([Mey94b]).

$$\mathcal{K} := \bar{\mathbf{B}}^T \bar{\mathbf{M}}_L^{-1} \bar{\mathbf{B}} \tag{2.1}$$

Im Rahmen des angewandten Parallelisierungskonzeptes ist $\mathcal{K}$ zudem nur durch die Faktoren $\bar{\mathbf{M}}_L$ und $\bar{\mathbf{B}}$ auf den Prozessoren verfügbar. Bei jeder Matrix- Vektor-Multiplikation muß daher die Multiplikation in (2.1) ausgeführt werden. Die Generierung der Matrix $\mathcal{K}$ auf dem Parallelrechner setzt eine komplizierte, überlappende Datenstruktur voraus, die mit den vorhandenen Softwarewerkzeugen für Netzgenerierung und Kommunikation nicht erzeugt und verarbeitet werden kann.
Aufgrund dieser besonderen Situation kommt der Vorkonditionierung des Systems

(2.1) besondere Aufmerksamkeit zu. In einer Reihe von numerischen Testrechnungen wurde hierzu der folgende Operator untersucht:

$$\mathbf{C}_{\mathcal{K}}^{-1} = f_J \mathbf{J}_{P_J}^{-1} \; + \; \sum_{j=1}^{J-1} f_j \mathbf{S}_{P_j} \; \mathbf{J}_{P_j}^{-1} \; \mathbf{S}_{P_j}^T + \; f_{gg} \mathbf{S}_{P_0} \; \mathbf{C}_{gg}^{-1} \mathbf{S}_{P_0}^T \tag{2.2}$$

wobei:

$\mathbf{J}_{P_k}$ - Hauptdiagonale des Laplacian (FEM-Raum des Druckes), eingeschränkt auf Knoten des Levels k

$\mathbf{S}_{P_k}^T$ - Basistransformation (Restriktion) vom FEM-Raum des Druckes zur Knotenbasis von Level k

$\mathbf{S}_{P_k}$ - Basistransformation (Prolongation) von der Knotenbasis von Level k zum FEM-Raum des Druckes

$\mathbf{C}_{gg}$ - Grobgittermatrix, Approximation des Laplacian oder exakte Grobgittermatrix

f_{gg} - Wichtungsfaktor Grobgittersolver, $f_{gg} = f_{gg}(J, ...)$

$f_k = (fac)^k$ - BPX - Wichtungsfaktor zum Level $k = 1, 2, ..., J$

Anhand vorliegender Ergebnisse läßt sich die Abhängigkeit der Iterationszahlen im CG von den Parametern fac und f_{gg}, von der Wahl des Grobgitteroperators, von der Komplexität des Grobnetzes und vom Verfeinerungslevel studieren.
Als Grobgitteroperatoren wurden eine Approximation des diskreten Laplacians (AGG) und die exakte Realisierung (EGG) von (2.1) auf dem Grobgitter betrachtet. Die bereits im 2D - Algorithmus eingesetzte Approximation des Laplacians entsteht durch die Assemblierung einer elementaren Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

für jede *Kante* des Grobnetzes. Die so konstruierte globale Matrix entspricht der Differenzenapproximation des Laplace - Operators auf einem topologisch äquivalenten, orthogonalen Netz mit Kantenlänge 1.0 (7-Punkte-Stern).
Der exakte Grobgitteroperator wird (auf einem Prozessor) assembliert und faktorisiert. Hauptproblem ist, die Matrix - Matrix - Multiplikation bei Kompaktspeicherung von $\bar{\mathbf{B}}$ auszuführen. Der hierbei (einmalig) anfallende Aufwand kann, besonders auf umfangreichen Grobnetzen, recht hoch sein. In Anbetracht der scheinbar deutlichen Vorzüge des exakten Grobgitteroperators wurden wesentlich niedrigere Iterationszahlen bei Verwendung dieser Matrix erwartet. Die Ergebnisse zeigen überraschenderweise keine signifikanten Vorteile für die exakte Grobgittermatrix (siehe Bild (2.3) und Tabellen (2.2) und (2.3)). Als Argumente kann man anführen, daß bei größerer Levelanzahl die konkrete Gestalt des Grobgittersystems an Bedeutung verliert und daß für quasiuniforme Netze (trifft auf die Beispiele cube8 und cube48 zu), die approximierte „nahe" an der exakten Grobgittermatrix liegt. Für die Verwendung der exakten Grobgittermatrix spricht, daß auf dem Parallelrechner kein signifikanter Unterschied bei der Rechenzeit/Iteration feststellbar ist und die optimale Wichtung f_{gg} nicht von der Netzkonstante des konkreten Beispieles abhängt. Allerdings ist nur bei komplexen Grobnetzen und geringer Verfeinerungstiefe ist mit etwas niedrigeren Iterationszahlen zu rechnen.

		Approximierter Grobgitterlöser								Exakter Grobgitterlöser						
		fac								fac						
f_{gg}		2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0		2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
0.1										40	38	38				
0.5		40								36	34	37	39			
1.0		37	36	38						36	32	35	37			
5		36	35	36						44	33	29	31	34		
10		38	31	35								32	27	30	32	
20		37	30	33									30	27	29	
50		37	30	28	31								35	32	29	28
100		37	29	29	28	31	34								32	29
200		40	33	27	26	28	29									34
300				29	27	25	28									
500				31	26	26	25	27								
750					28	26	26	25								
1000						27	25	26								
2000							27	24								
4000							29	27								
o. GG		40	35	34	36	39	41	43		40	35	34	36	39	41	43
Jacobi		56								56						

Testbeispiel : Würfel, Hexaeder
Grobgitter : 8 Elemente, 27 Knoten, uniform
Level : 3
ε : 10^{-4}

Tabelle 2.2: Iterationszahlen des Druckkorrektursystems, triviales Grobgitter

		Approximierter Grobgitterlöser							Exakter Grobgitterlöser					
		fac							fac					
f_{gg}		2.0	4.0	6.0	8.0	10.0	12.0		2.0	4.0	6.0	8.0	10.0	12.0
0.1		48	49											
0.2		46	46	47					51					
0.5		47	41	41	44				47	46				
1.0		53	43	40	38	43	45		45	41	43			
2			46	42	39	36	39		52	40	39	40		
4			55	45	42	39	38			43	38	37	38	39
10					47	45	41				43	38	35	35
20												44	39	36
o. GG		123	125	139	155				123	125	139	155		
Jacobi		215							215					

Testbeispiel : Benchmark (Zylinder), Hexaeder
Grobgitter : 700 Elemente, 1050 Knoten, nicht uniform
Level : 2
ε : 10^{-4}

Tabelle 2.3: Iterationszahlen des Druckkorrektursystems, komplexes Grobgitter

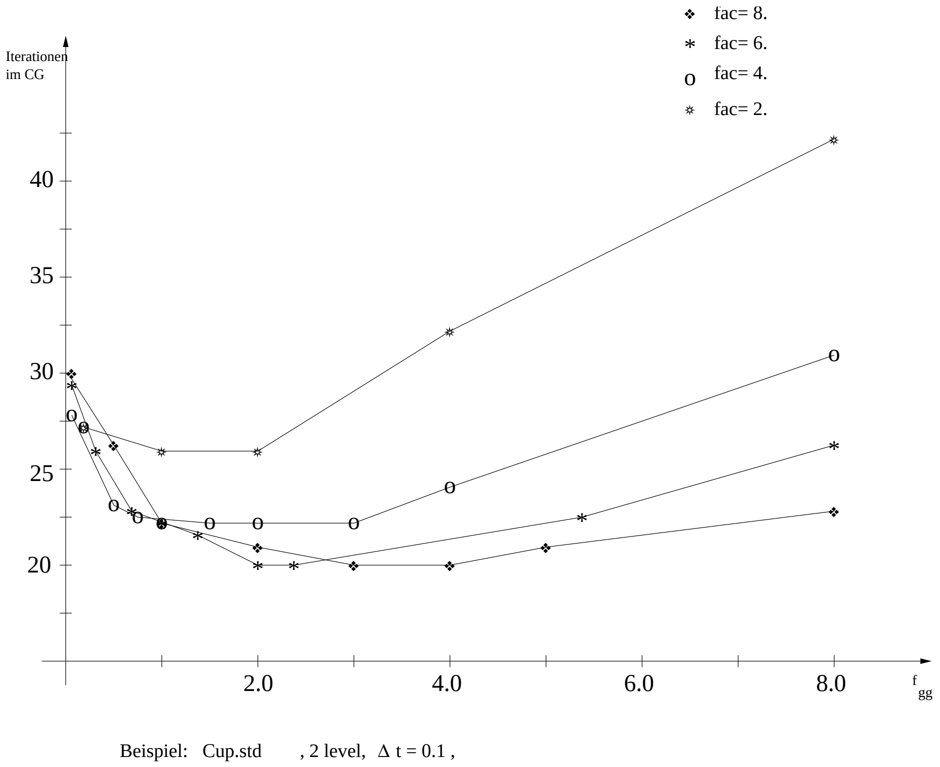


Abbildung 2.2: Iterationszahlen im CG bei verschiedener Wahl von fac (exakter Grobgitteroperator)

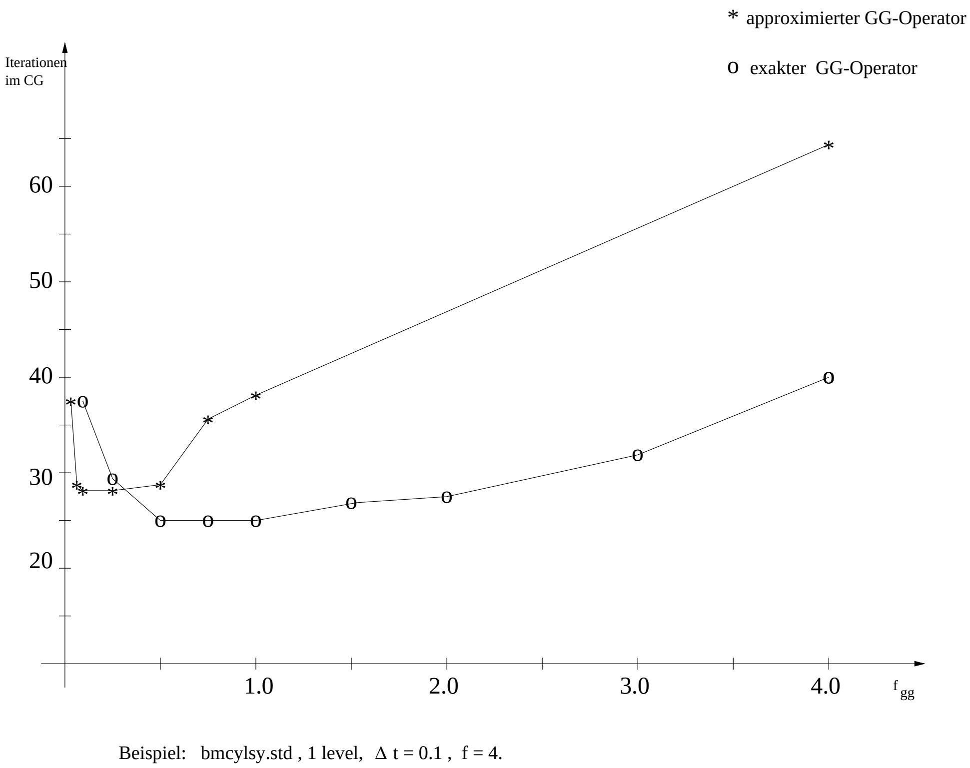


Abbildung 2.3: Iterationszahlen im CG bei verschiedener Wahl des Grobgitteroperators

In einer weiteren Tabelle (2.4) sind einige Iterationszahlen für verschiedene Beispiele, Verfeinerungslevel und Vorkonditionierungstechniken gegenübergestellt.
Zuammenfassend werden folgende Schlußfolgerungen gezogen:
Der Vorteil der Anwendung einer hierarchischen Vorkonditionierungstechnik gegenüber der trivialen Jacobi - Vorkonditionierung kommt jeweils erst für Beispiele mit einer genügenden Verfeinerungstiefe zum Tragen.
Der Einsatz von Grobgitterlösern erbringt nur für relativ komplexe Grobnetze einen Gewinn an Effektivität. Es spielt dabei praktisch keine Rolle, ob das Grobgittersystem exakt oder in der oben beschriebenen Form approximiert generiert wird.
Für die Wichtung der einzelnen Gitterlevel wird aus theoretischen Überlegungen ([BPX90]) der Koeffizient $f_k = 2^k$ also $fac = 2$ vorgeschlagen. Alle Untersuchungen mit (2.2) zeigten jedoch, daß höhere Mantissen (etwa $fac = 6, ..., 12$) vorzuziehen sind (siehe z.B. Bild (2.2)). Eine theoretische Erklärung hierfür steht noch aus.
Zwischen Hexaedernetzen und Tetraedernetzen sind in der Frage der Vorkonditionierung von (2.1) praktisch keine Unterschiede sichtbar.

			Verfeinerungslevels			
Beispiel	Vorkonditionierung		0 Level	1 Level	2 Level	3 Level
Benchmark (Hexaeder)	Jacobi		52	106	215	-
	BPX ohne GG (opt.)		52	80	123	-
	BPX ex. GG (opt.)		2	24	35	-
	BPX appr. GG (opt.)		32	27	36	-
Würfel (Hexaeder)	Jacobi		17	25	35	56
	BPX ohne GG (opt.)		17	21	25	34
	BPX ex. GG (opt.)		1	18	23	27
	BPX appr. GG (opt.)		18	20	23	24
Würfel (Tetraeder)	Jacobi		17	21	30	55
	BPX ohne GG (opt.)		17	20	26	33
	BPX ex. GG (opt.)		1	18	22	27
	BPX appr. GG (opt.)		20	18	23	24

Tabelle 2.4: Vergleich der Iterationszahlen des Druckkorrektursystems in Abhängigkeit von Vorkonditionierungsoperator und Verfeinerungstiefe

Bei der Lösung des symmetrischen Gleichungssystems für Berechnung der Geschwindigkeit wird, parametergesteuert, eine Diagonalskalierung (Jacobivorkonditionierung) oder eine mit Diagonalskalierung kombinierte BPX- Vorkonditionierung für jede Komponente angewandt.

$$\bar{\mathbf{C}}_v^{\,-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1^{-1} & O & O \\ O & \mathbf{C}_2^{-1} & O \\ O & O & \mathbf{C}_3^{-1} \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

mit: $\mathbf{C}_i = \begin{cases} \mathbf{C}_{BPX_i} & \text{falls} \quad CFL/Re_h \geq \tilde{c} \\ \mathbf{J}_{A_i} & \text{sonst} \end{cases}$

Der hierarchische Vorkonditionierungsoperator $\mathbf{C}_{BPX_i}$ weist prinzipiell die gleiche Struktur wie $\mathbf{C}_{\mathcal{K}}$ auf. Die Steuergröße für die Umschaltung zwischen beiden Techniken ist das Verhältnis von Courantzahl und Gitterreynoldszahl ((2.5), ([Mei94])).

$$S_v = \frac{CFL}{Re_h} = \frac{\Delta t \nu}{h^2} \tag{2.5}$$

Die kombinierte Methode findet Anwendung bei Werten von $S_v > 2...5$.
Es sei an dieser Stelle darauf verwiesen, daß auch das betrachtete semiimplizite Projektionsverfahren in diesem Bereich von S_v veränderte Eigenschaften aufweist (siehe Abschnitt (2.4.1.2)). Bisher durchgeführte Testrechnungen (sowohl 2D als auch 3D) zeigen, daß in vielen praktischen Fällen die Jacobivorkonditionierung zu befriedigendem Konvergenzverhalten des CG-Verfahrens führt. Für räumliche Aufgaben kommt dabei zur Geltung, daß der Verkleinerung der Ortsschrittweite h enge praktische Grenzen gesetzt sind.

Für die Vorkonditionierung der unsymmetrischen Systeme, die aus der Diskretisierung der Transportgleichungen resultieren, kann prinzipiell eine zu (2.4) analoge kombinierte Strategie Anwendung finden. Allerdings spielt für das Konvergenzverhalten dieser Syteme außer (2.5) vor allem das Gewicht des konvektiven Anteiles eine entscheidende Rolle. Da bei moderat verfeinerten Rechengittern der konvektive den diffusiven Matrixanteil häufig überwiegt (entspricht $Pe_h > 1$), ist die Frage nach einer geeigneten (parallelen) Vorkonditionierungstechnik für den konvektiven Teiloperator zu stellen. Hierzu entsteht an der Fakultät für Mathematik z.Z. die Diplomarbeit von Herrn H. Rhein mit dem Titel „Downwind - Knotennummerierung zur Vorkonditionierung konvektiv dominanter Probleme“.
Bei der kombinierten Anwendung von verschiedenen Vorkonditionierungsoperatoren für den diffusiven, den konvektiven und den Massenmatrixanteil sind Probleme der Konvergenz beim CGS-Algorithmus zu beachten (Tendenzen zu chaotischem Konvergenzverhalten, siehe auch ([Mei94])). In der praktischen Rechnung wird daher für die unsymmetrischen Gleichungssysteme vorerst ausschließlich mit der Jacobivorkonditionierung gearbeitet.

2.4.1.2 Untersuchungen zur Modifizierung des Projektionsverfahrens

Als grundlegende Methode zur numerischen Behandlung der Kopplung zwischen Druck und Geschwindigkeit in der Navier - Stokes - Gleichung wird eine Projektionstechnik angewandt. In einem ersten Schritt ist hierbei eine Zwischengeschwindigkeit $\underline{\tilde{v}}$ aus der diskretisierten (und ggf. linearisierten) Impulsgleichung (2.6) zu berechnen, die in einem Projektionsschritt (2.7) in den Raum der diskret divergenzfreien Funktionen abgebildet wird.

$$\bar{\mathbf{S}}\underline{\tilde{v}} = \underline{\bar{g}} - \Delta t \bar{\mathbf{B}} \underline{p}_0 \tag{2.6}$$

$$\underline{v} = \underline{\tilde{v}} - (\Delta t/\gamma)\bar{\mathbf{D}}^{-1}\bar{\mathbf{B}}(\underline{p}_1 - \underline{p}_0) \qquad \text{mit} \quad \bar{\mathbf{B}}^\top \underline{v} = 0 \tag{2.7}$$

In den Beziehungen (2.6),(2.7) bezeichnet $\bar{\mathbf{S}}$ den aus konvektivem, viskosem und Massenmatrixanteil bestehenden linearen oder nichtlinearen Operator in der Be-

wegungsgleichung, $\underline{\bar{g}}$ eine Zusammenfassung aller Glieder der rechten Seite und $\bar{\mathbf{D}}$ einen linearen Vorkonditionierungsoperator für den Projektionsschritt. Überstrichene Größen symbolisieren Vektoren bzw. Blockmatrizen.
Die konkrete Realisierung des Projektionsverfahrens für die Lösung des Strömungsproblems hat beträchtlichen Einfluß auf die Effektivität und Robustheit des gesamten Simulationssystems.
Aus den verschiedenen Möglichkeiten zur Zeitdiskretisierung, zur Behandlung der Nichtlinearität, zur Einführung von Stabilisierungstermen für dominierende Konvektion und zur Wahl des Operators $\bar{\mathbf{C}}$ ergibt sich eine größere Anzahl von Varianten der beschriebenen Grundidee.
Zur Beurteilung der verschiedenen Verfahren sind systematische numerische Tests unabdingbar, die wiederum nach recht unterschiedlichen Kriterien wie Rechenzeit, Speicherverbrauch, Robustheit, Parallelisierbarkeit usw. bewertet werden können. Im Projektantrag sind eigene Untersuchungen zu diesem Problemkreis vorgesehen, die jedoch aus Gründen der Bearbeitungskapazität zunächst auf einige ausgewählte Fragestellungen beschränkt werden mußten.

Zeitdiskretisierung, Stabilisierung
Wie Untersuchungen von St. Turek ([Tur96], [Tur97]) zeigen, versprechen Verfahren höherer Ordnung in der Zeit einen deutlichen Gewinn an Effizienz, wenn es gleichzeitig gelingt, den numerischen Aufwand pro Zeitschritt etwa konstant zu halten.
Unter dem Aspekt, daß der Projektionsschritt im Verfahren (2.6),(2.7) das aufwendigere Problem darstellt, von der Zeitdiskretisierung jedoch nicht abhängt, erscheint diese Zielstellung erreichbar.
Im Zusammenhang mit gekoppelten Aufgaben muß allerdings beachtet werden, daß der Zeitschritt Δt häufig nicht von der Approximation des Strömungsproblemes, sondern von Transportprozessen mit kleinen charakterischen Zeiten, bestimmt wird! In solchen Fällen ist evtl. eine subcycling-Strategie mit größerem Zeitschritt für das Strömungsproblem denkbar.
Die implementierte Variante des semiimpliziten Projektionsverfahrens ([GMM94], [GC90]) beinhaltet (durch die explizite Behandlung des konvektiven Gliedes) eine Zeitdiskretisierung erster Ordnung.
Zur Stabilisierung des Zeitintegrationsprozesses dient ein sog. „balancing tensor diffusivity“(BTD) - Term, der, gewichtet mit Δt, in seiner Struktur identisch ist mit dem Hauptterm des SUPG-Verfahrens (siehe z.B. [BH82], [TLGBG92]).
Der BTD-Term hat in diesem Verfahren zwei Funktionen:
1. Er wirkt als Kompensation für den Zeitintegrationsfehler bei der expliziten Behandlung des konvektiven Gliedes und stabilisiert damit den Zeitintegrationsprozess ([GCLU84]).
2. Er dient zur Stabilisierung des diskreten Operators im aktuellen Zeitschritt bei dominierender Konvektion.
Für genügend klein gewählte Zeitschritte ($\Delta t < \delta_0$) ist die Stabilität des Verfahrens auch ohne den BTD-Term gewährleistet. Die Schranke δ_0 ist eine Funktion der Gitterreynoldszahl Re_h und ist für größere Werte von Re_h sehr restriktiv.
Um grundlegende Änderungen des Algorithmus zunächst zu vermeiden, wurde ei-

ne auf der Defektkorrektur basierende Methode betrachtet. Diese Herangehensweise wird besonders durch die Überlegung gestützt, daß bei gekoppelten Aufgaben häufig ohnehin ein iteratives Vorgehen im Zeitschritt erforderlich ist.
Das Projektionsverfahren, als ein iteratives Verfahren (Iterationsindex k=1,2...) aufgefaßt, wird beschrieben durch:

$$\begin{aligned}\left[\bar{\mathbf{M}} + \Delta t\, \theta\, \nu_0\, \bar{\mathbf{A}} + \Delta t\, \bar{\mathbf{A}}_{BTD}\,(\underline{v}^n)\right]\, \tilde{\underline{v}}_k^{n+1} = \bar{\mathbf{M}}\underline{v}^n - \Delta t \frac{1}{2}\bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,(\underline{p}_{k-1}^{n+1} + \underline{p}^n) \\ +\Delta t\, \left\{\theta\, \underline{\bar{F}}_k^{n+1} + (1-\theta)\left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\, \bar{\mathbf{A}}\, \underline{v}^n\right) - \bar{\mathbf{C}}(\underline{v}^n)\, \underline{v}^n\right\}\,,\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}_k^{n+1} &= \bar{\mathbf{B}}^\top \tilde{\underline{v}}_k^{n+1}\,, && (2.9)\\ \underline{v}_k^{n+1} &= \tilde{\underline{v}}_k^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}_k^{n+1}\,, && (2.10)\\ \underline{p}_k^{n+1} &= \underline{p}_{k-1}^{n} + \frac{\gamma}{\Delta t}\, \underline{\varphi}_k^{n+1} \qquad \text{mit} \quad \gamma = 2. && (2.11)\end{aligned}$$

Durch Hinzufügen von Gliedern (2.12) auf der rechten Seite der diskreten Impulsbilanz (2.8) wird iterativ eine zeitliche Approximation 2.Ordnung für das konvektive Glied erreicht.

$$(\Delta t)/2\ [\bar{\mathbf{C}}(\underline{v}^n)\, \underline{v}^n - \bar{\mathbf{C}}(\underline{v}_{k-1}^{n+1})\, \underline{v}_{k-1}^{n+1}] \tag{2.12}$$

Das so modifizierte Verfahren arbeitet sehr stabil, pro Zeitschritt reichen 3-4 Iterationen zur Konvergenz aus. Eine weitere Variante dieser Herangehensweise entsteht, wenn nur die diskrete Impulsgleichung in die Iteration einbezogen wird und die aufwendigere Druckkorrektur nur einmal pro Zeitschritt erfolgt.
Durch die bessere Stabilität der Zeitintegrationsmethode vergrößert sich die Schranke δ_1 für den Zeitschritt ($\Delta t < \delta_1$), für die auf den BTD-Term verzichtet werden kann. In diesem Falle läßt sich die Approximationsordnung $O(\Delta t^2)$ anhand von Testrechnungen nachweisen. Bei Hinzunahme von $\bar{\mathbf{A}}_{BTD}$ gilt dies offensichlich nicht.
In einem weiteren numerischen Experiment wurde versucht, die Defektkorrekturidee auch auf das BTD-Glied anzuwenden, indem auf der rechten Seite von (2.8) ein Glied (2.13) hinzugefügt wurde.

$$\Delta t\ \bar{\mathbf{A}}_{BTD}\ \ (\underline{v}^n)\underline{v}_{k-1}^{n+1} \tag{2.13}$$

Das Ergebnis ist ebenfalls ein nur bedingt stabiles Verfahren ($\Delta t < \delta_2$), wobei für die Schranke δ_2 allerdings gilt $\delta_2 > \delta_1$.
Aus den vorliegenden Untersuchungen kann der Schluß gezogen werden, daß für geeignete Wahl des Zeitschrittes ($\Delta t < \delta(Re_h)$) eine Approximation 2.Ordnung in Δt erreicht wird. Um auch für den kritischen Bereich höherer Gitter-Reynoldszahlen zu stabilen und konsistenten Verfahren mit $O(\Delta t^2)$ zu gelangen, ist die Einbeziehung einer verbesserten Methode der Stabilisierung für konvektionsdominante Systeme erforderlich.
Für diesen Zweck bieten sich die SUPG- bzw. streamline diffusion- Techniken,

die bereits für die Behandlung der skalaren Transportprobleme eingesetzt werden, an. Die formale Übertragung dieser Methodik auf das System der Navier-Stokes-Gleichungen (siehe etwa [BH82]) stößt jedoch auf Konsistenzprobleme. Diese äußern sich in konkreten Anwendungen so, daß sich unphysikalische dissipative Effekte zeigen ([TLGBG92]), ähnlich wie dies bereits für den BTD-Term beobachtet wurde ([GC90]). Eine Kontrolle über diese Fehler ist bei Verwendung von Raum-Zeit-Elementen oder mit einer von Tezduyar vorgeschlagenen Unterteilung des Zeitschrittes in 6 Teilschritte („T6“) erreichbar.
Beide Methoden sind jedoch mit stark erhöhtem Aufwand pro Zeitschritt verbunden. Im Hinblick auf die ausgangs angesprochene Effizienzproblematik ist noch nicht entschieden, ob die Mehrschrittechnik (T6) implementiert werden soll.

Untersuchungen zu Konvergenzaspekten des Projektionsverfahrens
Bei der Anwendung des Projektionsverfahrens auf eine relativ breite Klasse von Strömungsproblemen entsteht die Frage nach der Robustheit dieser Methodik. Es wurde nach Ursachen für das Versagen des Projektionsverfahrens in bestimmten Fällen und nach Anwendungsgrenzen gesucht. Zur Veranschaulichung der wirkenden Mechanismen werde nochmals das iterative Verfahren in etwas allgemeinerer und kompakterer Form betrachtet:

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{S}}\,\underline{\tilde{v}}_k^{n+1} &= \Delta t f^n - \frac{1}{2}\Delta t \bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{B}}\,(\underline{p}_{k-1}^{n+1} + \underline{p}^n) && (2.14)\\
\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{D}}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}_k^{n+1} &= \bar{\mathbf{B}}^\top \underline{\tilde{v}}_k^{n+1}\,, && (2.15)\\
\underline{v}_k^{n+1} &= \underline{\tilde{v}}_k^{n+1} - \bar{\mathbf{D}}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}_k^{n+1}\,, && (2.16)\\
\underline{p}_k^{n+1} &= \underline{p}_{k-1}^{n} + \frac{\gamma}{\Delta t}\,\underline{\varphi}_k^{n+1} \qquad \text{mit} \quad \gamma = 2. && (2.17)
\end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Beschreibung werde angenommen, daß weder $\bar{\mathbf{S}}$ noch die rechte Seite f^n von $\underline{v}_k^{n+1}$ abhängen möge.
Der als linear angenommene Operator $\bar{\mathbf{S}}$ sei wiederum eine Zusammenfassung aller auf der rechten Seite der Impulsgleichung erscheinenden Anteile, im Falle des semiimpliziten Verfahrens (2.8)...(2.11) also

$$\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{M}} + \Delta t\,\theta\,\nu_0\,\bar{\mathbf{A}} + \Delta t\,\bar{\mathbf{A}}_{BTD}. \tag{2.18}$$

Die Anwendung des Projektionsverfahrens beruht auf der schnellen Konvergenz der Folge von Drücken $(\underline{p}_1^{n+1}, \underline{p}_2^{n+1}, ...)$ bzw. der Geschwindigkeiten $(\underline{v}_1^{n+1}, \underline{v}_2^{n+1}, ...)$.
Im angestrebten günstigsten Falle reicht eine Iteration pro Zeitschritt aus.
Um den Prozeß besser zu verstehen, wurde das Verhalten des Residuums $R(\underline{p}_k)$ in der Bestimmungsgleichung für den neuen Druck betrachtet. (Der Index n für den Zeitschritt wird im folgenden weggelassen.)
Nach einigen Umformungen ergibt sich:

$$R(\underline{p}_{k+1}) = \left(\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{K}}^{-1}\right) R(\underline{p}_k)\ , \tag{2.19}$$

mit

$$\tilde{\mathbf{T}} = \bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{D}}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\ , \quad \tilde{\mathbf{K}} = \bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{S}}^{-1}\bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{B}}. \tag{2.20}$$

Für das Residuum der Bestimmungsgleichung für die Geschwindigkeit erhält man:

$$R(\underline{v}_{k+1}) = \Delta t \left(\bar{\mathbf{S}}\bar{\mathbf{D}}^{-1} - \bar{\mathbf{L}}\right) \bar{\mathbf{B}}\tilde{\mathbf{K}}^{-1} R(\underline{p}_k) \tag{2.21}$$

Eine rekursive Beziehung analog (2.19) kann für die Geschwindigkeitsresiduen nicht angegeben werden.
Anhand des Fehlerübergangsoperators $\mathbf{E} = \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{K}}^{-1}$ kann das Verhalten des Projektionsverfahrens beurteilt werden. Für das „exakte" Verfahren mit $\bar{\mathbf{D}} = \bar{\mathbf{S}}$ und $\bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{I}}$ ergibt sich offensichtlich $\mathbf{E} = \mathbf{0}$, d.h. dieses Verfahren liefert für $k = 1$ die exakte Lösung.
Das Verfahren nach Gresho ([GC90]) führt mit

$$\bar{\mathbf{D}} = \bar{\mathbf{M}}_L, \bar{\mathbf{L}} = \bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{M}}_L^{-1} \tag{2.22}$$

zu einen Operator

$$\mathbf{E} = \bar{\mathbf{B}}^\top(\bar{\mathbf{I}} - \bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{S}}^{-1})\bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}}(\bar{\mathbf{B}}^\top\bar{\mathbf{M}}_L^{-1}\bar{\mathbf{B}})^{-1} \tag{2.23}$$

An der Beziehung (2.23) sind die Ursachen für die sehr guten Eigenschaften dieses Verfahrens für den Fall $\bar{\mathbf{S}} \approx \bar{\mathbf{M}}$ ablesbar. Andererseits wird deutlich, daß für den Fall, daß der viskose Anteil in $\bar{\mathbf{S}}$ groß ist, das Residuum pro Iteration u.U. kaum reduziert wird.
Die Eigenwerte λ_i der Matrix $\bar{\mathbf{I}} - \bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{S}}^{-1}$ lassen sich für den Fall, daß die Matrix $\bar{\mathbf{S}}$ sich als Summe aus der Massenmatrix und dem diskreten Laplacian

$$\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{M}} + \alpha\bar{\mathbf{A}} \tag{2.24}$$

darstellen läßt, wie folgt abschätzen ([Hac86]):

$$O\left(\frac{\alpha}{1+\alpha}\right) \leq \lambda_i \leq O\left(\frac{\alpha h^{-2}}{1+\alpha h^{-2}}\right) \tag{2.25}$$

Für das Iterationsverfahren (2.14)...(2.17) ist es somit entscheidend, welche Werte der Parameter

$$\beta = \frac{\alpha h^{-2}}{1+\alpha h^{-2}} \approx \|\bar{\mathbf{I}} - \bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{S}}^{-1}\|$$

annimmt. Wegen $\alpha = \nu_0 \Delta t$ findet man

$$\beta = \frac{\frac{\nu_0 \Delta t}{h^2}}{1 + \frac{\nu_0 \Delta t}{h^2}}. \tag{2.26}$$

Die Konvergenzrate des Verfahrens (2.14)...(2.17) wird somit von

$$S_v = \frac{\Delta t \nu_0}{h^2} = \frac{CFL}{Re_h} \tag{2.27}$$

bestimmt.
Vorliegende Untersuchungen von Vorgängen in extrem kleinen Lösungsgebieten

(Strömungsvorgänge in Mikrobauteilen) bestätigen diese Abschätzungen. Für größere Werte von S_v konvergiert das Projektionsverfahren sehr langsam und wird damit uneffektiv.
Für den Grenzfall stark dominierender viskoser Glieder ($S_v \gg 1$) wurde eine modifizierte time - stepping - Strategie angewandt, die eine Simulation solcher Vorgänge erlaubt:
In einem Zeitschrittzyklus wird zunächst ein Zeitschritt Δt ausgeführt, der den üblichen Kriterien der Approximation des Problemes gerecht wird. In diesem Schritt werden die Randbedingungen weitergerückt und ggf. gekoppelte Größen neu berechnet. Das Projektionsverfahren liefert, wie festgestellt, keine konvergierten Werte für Druck und Geschwindigkeit. Ausgehend von der Erkenntnis, daß sich Strömungen mit $Re \ll 1$ schnell zeitlich „ausbilden", wird nun eine Folge von n „kleinen" Zeitschritten Δt_β ausgeführt, wobei Δt_β so gewählt wird, daß gilt

$$\frac{\Delta t_\beta \nu_0}{h^2} = O(1). \tag{2.28}$$

Bereits nach wenigen Schritten stellt sich Konvergenz von Druck und Geschwindigkeit ein. Die Randbedingungen und Transportgrößen bleiben im Zeitintervall $n\Delta t_\beta \ll \Delta t$ praktisch konstant. Der so beschriebene Zyklus kann iterativ wiederholt werden, wenn die Strömungsgrößen auf der neuen Zeitschicht in die Integration der Transportprobleme einbezogen werden sollen.
Das beschriebene Verfahren erweist sich als effektiv, es ersetzt praktisch ein Uzawa - Verfahren für die numerische Behandlung eines verallgemeinerten Stokes - Problemes im Zeitschritt Δt.
Gegenstand von noch laufenden Untersuchungen ist die Frage nach einer geeigneten Strategie für beliebige Werte des Parameters S_v.

2.4.1.3 Zur Erweiterung der physikalischen Aufgabenklasse

Aus Kontakten zu Anwendern und bei kritischer Bewertung der erreichten Ergebnisse der Modellierung praktisch interessierender Aufgaben ergeben sich noch deutlich erkennbare Defizite der im Experimentalsystem betrachteten Modellklasse. Um den Bedingungen der ins Auge gefassten Problemstellungen besser gerecht zu werden, erfolgten zielgerichtet Modifikationen und Erweiterungen des Programmsystems. Eine wichtige Änderung betrifft die Behandlung von Vorgängen mit veränderlicher Dichte, über die im folgenden kurz berichtet wird.

Weitere laufende Überlegungen gelten den Problemkreisen Turbulenzmodellierung, Strahlungswärmetransport und Vorgänge mit zeitlich veränderlichem Lösungsgebiet.

Die auf diesen Gebieten durchgeführten Untersuchungen richten sich nicht vorrangig auf die Entwicklung *neuer* Techniken, sondern haben die begründete Auswahl geeigneter Modelle und Verfahren zum Einbau in das vorhandene parallele Simulationssystem zum Ziel.
Modellierung von Strömungsvorgängen mit erheblichen Dichtevariationen
Zur Simulation von Strömungsvorgängen mit geringen Dichteunterschieden werden

häufig die Algorithmen für inkompressible Vorgänge genutzt und damit ein gewisser Modellfehler in Kauf genommen. Bei erheblichen Schwankungen der Dichte im Lösungsgebiet oder wenn die Dichtevariation relevante Rückwirkungen auf den Gesamtvorgang zeigt, ist diese Vorgehensweise ungeeignet.
Die numerische Behandlung der *vollständigen kompressiblen* Gleichungen ist andererseits bei niedrigen Geschwindigkeiten (d.h. $Ma \ll 1$) nicht erforderlich und häufig auch aus Effektivitätsgründen nicht sinnvoll ([LG96]).
Typische Vertreter für diese Problemklasse sind Vorgänge mit chemischen Reaktionen (z.B. Verbrennung). Lokale Temperaturdifferenzen von $\sim 10^3 K$ sowie das Auftreten von Stoffkomponenten mit unterschiedlichen Dichten bewirken erhebliche Variationen der Gesamtdichte im Lösungsgebiet.
Die bislang verwendete Boussinesq - Approximation eignet sich nur für kleine Dichtevariationen und stellt für derartige Vorgänge ein zu grobes Modell dar. Dies zeigte u.a. auch der Vergleich numerischer Ergebnisse mit vorliegenden experimentellen Daten einer Wasserstoffflamme ([GWKKS96]).

Eine mögliche (und naheliegende) Modifikation des inkompressiblen Modelles stellt die Betrachtung einer vereinfachten Kontinuitätsbeziehung

$$\nabla \cdot (\varrho \vec{v}) \quad = 0 \tag{2.29}$$

dar. Die Dichte ϱ ist hierbei in jedem Zeitschritt aus einer Zustandsgleichung, etwa

$$\varrho \qquad = \frac{Mp}{R^* T} \tag{2.30}$$

zu berechnen.
Dieses sog. „inelastische" Modell ([SWWAD93]) wurde in einem ersten Bearbeitungsschritt in das numerische Verfahren integriert. Algorithmische Modifikationen ergeben sich aus der Wichtung einiger Matrizen und Vektoren mit der Funktion $\chi = \varrho(x)/\varrho_0$ und der Berücksichtigung der von $\nabla \vec{v}$ abhängigen Terme in der viskosen Matrix und in der Energiegleichung.
Bei einer kritischen Analyse der numerischen Ergebnisse zeigen sich jedoch Schwächen des Ansatzes (2.29). Durch die erfolgte Vernachlässigung der Zeitableitung der Dichte ist das Modell nicht geeignet, Vorgänge mit relativ starker temporärer Dichteänderung richtig zu beschreiben. Insbesondere zeigen sich dann qualitative Fehler in der Energiebilanz, herrührend aus der Berechnung des Expansionsgliedes. Entsprechende physikalische Verhältnisse liegen bei anwendungsrelevanten Problemen oft vor, z.B. beim Eintreten eines Strahles mit abweichender Dichte in ein Gebiet oder beim Voranschreiten eines steilen Temperaturgradienten.
Ein besser begründetes Modell für dichteveränderliche Problemstellungen kann daher nur durch die Berücksichtigung der vollständigen Kontinuitätsgleichung (2.31) erhalten werden.

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho \vec{v}) \quad = 0 \tag{2.31}$$

Es stellt sich die Frage nach der Abgrenzung dieser Modellklasse (Strömungen mit niedrigen Machzahlen) von den allgemeinen kompressiblen Strömungen, Untersuchungen zu diesem Problemkreis finden sich in ([P82],[ChP86],[Hori92],[LG96]).

Als Ausgangspunkt dient eine Aufspaltung des Druckes in einen thermodynamischen Anteil $p_T(t)$ und in einen dynamischen Anteil $p_d(x,t)$:

$$p(x,t) = p_T(t) + p_d(x,t) \tag{2.32}$$

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

$$p_T \;\gg\; p_d \tag{2.33}$$

Davon motiviert, kann bei der Berechnung der Dichte (2.30) und in der Energiegleichung auf den Anteil p_d verzichtet werden. In der Impulsgleichung erscheint andererseits nur der dynamische Druck, da $\nabla p_T = 0$ ist. Die somit erfolgte Entkopplung des dynamischen Druckanteiles von der Dichteberechnung bedeutet praktisch eine Unterdrückung der Ausbreitung von Schallwellen([P82]).
Im Ergebnis ergibt sich das folgende modifizierte Modell für ein Strömungsproblem mit gekoppeltem Wärmetransport:

$$\begin{aligned}
\varrho \left\{ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,\vec{v} \right\} &= -\nabla\, p_d + \nabla\cdot\left\{\eta\left(\nabla\,\vec{v} + (\nabla\,\vec{v})^\top\right)\right\} \\
&\quad -\frac{2}{3}\nabla\cdot\{\eta\,(\nabla\cdot\vec{v})\,I\} + \varrho\vec{f}\,, && (2.34)\\
\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\vec{v}) &= 0\,, && (2.35)\\
\varrho\left\{\frac{\partial e}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,e\right\} &= -p_T\nabla\cdot\vec{v} + \nabla\cdot\{\lambda\,\nabla T\} + Q && (2.36)
\end{aligned}$$

wobei $e = c_v T$ die innere Energie ist und die Dichte aus einer Zustandsgleichung

$$\varrho \quad = \frac{M p_T}{R^* T} \tag{2.37}$$

berechnet wird. Durch die Zerlegung des Druckes (2.32) stellt $p_T(t)$ eine zusätzliche Unbekannte dar. Deren zeitlicher Verlauf kann mit Hilfe einer gewöhnlichen Differentialgleichung, abgeleitet aus der Massenerhaltung und der Zustandsgleichung, bestimmt werden:

$$meas(\Omega)\frac{dp_T}{dt} + p_T\int\limits_\Omega \nabla\cdot\vec{v}\,dV = R\int\limits_\Omega \varrho\frac{DT}{Dt}\;dV \tag{2.38}$$

Bei der numerischen Umsetzung dieses Modelles stellt sich die Frage nach der Erfüllung einer globalen Massenerhaltung, die (bei geschlossenen Gebieten Ω) durch

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_\Omega \varrho\; dV \;=\; 0$$

beschrieben werden kann. Ob eine solche Forderung generell zur Korrektur des Druckes p_T herangezogen werden muß, ist in der Literatur umstritten ([ChP86], [LG96]) und wurde vorerst nicht näher untersucht. Allerdings besteht, wie man weiter unten sieht, ein Zusammenhang zwischen der numerischen Integration der Gleichung für den thermodynamischen Druck $p_T(t_{n+1})$ und einer numerischen Lösbarkeitsbedingung für das diskrete Strömungsproblem.
Wenn das Lösungsgebiet Ω mit der freien Umgebung in Verbindung steht, ist p_T insbesondere als konstant anzunehmen. Von dieser Annahme wurde vorerst ausgegangen.
Eine genauere Darstellung weiterer in das Modell eingehender physikalischer Annahmen ist in [Mei98] zu finden.

Zu Modifikationen des numerischen Verfahrens
Bei näherer Untersuchung der Gleichungen (2.34),(2.35),(2.36) zeigt sich, daß der im inkompressiblen Fall verwendete numerische Algorithmus weitgehend auf dieses Modell übertragbar ist. Die notwendige Anpassung des semiimpliziten Projektionsverfahrens werden kurz skizziert.
Bezeichnungsweise:
Anstelle der Dichte ϱ wird eine dimensionslose Funktion $\chi = \varrho/\varrho_0$ eingeführt. Bei der Bildung von Integralen in der schwachen Formulierung erscheint diese Funktion häufig als Gewichtsfunktion. Die resultierenden Matrizen und Vektoren erhalten deshalb den Index χ.
Beispiel: Massenmatrix

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

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

$$\begin{aligned} &\left[\bar{\mathbf{M}} + \Delta t\, \theta\, \nu_0\, \bar{\mathbf{A}} + \Delta t\, \bar{\mathbf{A}}_{BTD}\,(\underline{v}^n) \right] \underline{\tilde{v}}^{n+1} = \bar{\mathbf{M}} \underline{v}^n \\ &\quad + \Delta t \left\{ \theta\, \underline{\bar{F}}^{n+1} + (1-\theta) \left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\, \bar{\mathbf{A}}\, \underline{v}^n \right) - \bar{\mathbf{C}}(\underline{v}^n)\, \underline{v}^n - \bar{\mathbf{M}} \bar{\mathbf{M}}_L^{-1} \bar{\mathbf{B}}\, \underline{p}^n \right\} , \end{aligned} \tag{2.39}$$

$$\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{M}}_L^{-1} \bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}^{n+1} = \bar{\mathbf{B}}^\top \underline{\tilde{v}}^{n+1} , \tag{2.40}$$

$$\underline{v}^{n+1} = \underline{\tilde{v}}^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_L^{-1} \bar{\mathbf{B}}\, \underline{\varphi}^{n+1} , \tag{2.41}$$

$$\underline{p}^{n+1} = \underline{p}^n + \frac{\gamma}{\Delta t}\, \underline{\varphi}^{n+1} \qquad \text{mit} \quad 0 < \gamma \leq 2. \tag{2.42}$$

In (2.39) ... (2.41) stellen überstrichene Größen jeweils (raumdimensionsabhängige) Blockmatrizen dar, $\bar{\mathbf{A}}$ verkörpert viskose Anteile, $\bar{\mathbf{A}}_{BTD}$ den 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.
Die Einbeziehung einer variablen Dichte in die Impulsgleichung führt anstelle (2.39)

auf eine Beziehung

$$\left[\bar{\mathbf{M}}_\chi + \Delta t\,\theta\,\nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^\diamond + \Delta t\,\bar{\mathbf{A}}_{BTD\chi}\,(\underline{v}^n)\right]\,\underline{\tilde{v}}^{n+1} = \bar{\mathbf{M}}_\chi \underline{v}^n \tag{2.43}$$
$$+\Delta t\,\left\{\theta\,\underline{\bar{F}}^{n+1} + (1-\theta)\left(\underline{\bar{F}}^n - \nu_0\,\bar{\mathbf{A}}^\diamond\,\underline{v}^n\right) - \bar{\mathbf{C}}_\chi(\underline{v}^n)\,\underline{v}^n - \bar{\mathbf{M}}_\chi \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{p}^n\right\}\,.$$

Die Matrix $\bar{\mathbf{A}}^\diamond$ in (2.43) resultiert aus der Diskretisierung des vollständigen viskosen Gliedes in der Impulsgleichung (2.34). Auf eine Vereinfachung dieser komplexen Matrix zu einer Blockdiagonalmatrix, wie dies bei inkompressiblen Medien mit konstanter Viskosität möglich ist, wurde zunächst verzichtet. Diese Vereinfachung kann (bei konstanter Viskosität) jedoch durchgeführt werden, indem ein dynamischer Druck

$$\tilde{p_d} = p_d + \frac{2}{3}\left\{\eta\,(\nabla\cdot\vec{v})\,I\right\} \tag{2.44}$$

eingeführt wird. Die Substitution (2.44) stellt allerdings eine Modifikation des Druckiterationsverfahrens dar, die noch zu untersuchen ist.
Die Abbildung der Zwischengeschwindigkeit $\underline{\tilde{v}}^{n+1}$ erfolgt nicht wie bisher in den Raum der diskret divergenzfreien Funktionen, sondern in eine Mannigfaltigkeit, die durch eine Diskretisierung von (2.31) beschrieben werden kann.
Hierzu dienen anstelle von (2.40), (2.41) die folgenden Beziehungen:

$$\bar{\mathbf{B}}^\top \bar{\mathbf{I}}_\chi \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1} \;=\; \bar{\mathbf{B}}^\top(\bar{\mathbf{I}}_\chi \underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}}\underline{\chi}_t, \tag{2.45}$$

$$\underline{v}^{n+1} \;=\; \underline{\tilde{v}}^{n+1} - \bar{\mathbf{M}}_{\chi_L}^{-1}\bar{\mathbf{B}}\,\underline{\varphi}^{n+1}\,, \tag{2.46}$$

Die Aufdatierung des Druckes erfolgt weiterhin gemäß (2.42).
$\underline{\chi}$ bezeichnet hierbei die Diskretisierung der Funktion χ im FEM-Raum der Geschwindigkeit und $\underline{\chi}_t$ ist eine Approximation der zeitlichen Ableitung dieser Größe. In (2.45) 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,

$$\vec{Z} = \chi\vec{v} \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\mathbf{M}}\underline{Z} = \bar{\mathbf{M}}_\chi \underline{v} \tag{2.47}$$

interpretiert werden bzw. wird sie als Ergebnis einer Kollokationsmethode für $\vec{Z} = \chi\vec{v}$ erhalten.
Die Matrix $\hat{\mathbf{M}}$ in (2.45) verkörpert eine gemischte „Massenmatrix“, gebildet aus den FEM-Ansatzfunktionen des Druckes und der Geschwindigkeit.
Zur Vereinfachung des numerischen Modelles blieb die Abhängigkeit der Dichte von der Zeit innerhalb eines Zeitschrittes zunächst unberücksichtigt. Zur Einbeziehung dieses nichtlinearen Einflußfaktors in die Simulation, ist es eine sinnvolle Strategie, zuerst die Temperatur auf der neuen Zeitschicht t_{n+1} zu berechnen, daraus mittels (2.38) und (2.30) die Dichtefunktion für $t = t_{n+1}$ zu ermitteln und dann das Druckkorrekturverfahren mit $\underline{\chi}(t_{n+1/2})$ durchzuführen.
Wenn in jedem Zeitschritt ohnehin eine Iterationsschleife erforderlich ist, kann das

Aufdatieren der Dichte darin integriert werden.
Für den Fall, daß Dirichletrandbedingungen für die Geschwindigkeit auf dem gesamten Rand $\partial\Omega$ vorgeschrieben sind, ist, wie im Inkompressiblen, eine Orthogonalitätsbedingung bei der Lösung von (2.45) zu beachten:
Der Nullraum von $\bar{\mathbf{B}}$ enthält die konstante Funktion, daher muß die rechte Seite von (2.45) orthogonal zu einem Vektor $\vec{e} = (1, 1, ..., 1)^\top$ stehen:

$$\vec{e} \quad \perp \quad \bar{\mathbf{B}}^\top(\bar{\mathbf{I}}_\chi \underline{\tilde{v}}^{n+1}) - \hat{\mathbf{M}}\underline{\chi}_t \tag{2.48}$$

Wie man zeigen kann ([Mei98]), entspricht diese Orthogonalitätseigenschaft gerade einer FEM-Diskretisierung der Integralbilanz

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\vec{v}(t_{n+1}))\right] \, dV \quad = 0, \tag{2.49}$$

die physikalisch als globale Massenbilanz interpretierbar ist. Die *exakte* Erfüllung von (2.48) ist damit aber nicht a priori gegeben, sondern hängt offensichtlich von der konkreten Approximation von $\underline{\chi}_t$ und $\underline{\chi}$ und über (2.37) auch von $p_T(t_{n+1})$ ab. Setzt man demgegenüber (2.37) in (2.38) ein, so sieht man nach einigen Umformungen, daß (2.38) einer Integralbilanz

$$\int_\Omega T\left[\frac{\partial\varrho}{\partial t} + \nabla\cdot(\varrho\vec{v})\right] \, dV \quad = 0. \tag{2.50}$$

entspricht. Aus diesen Betrachtungen heraus erscheint es sinnvoll, zur Bestimmung des thermodynamischen Druckes (anstelle von (2.38)) auf eine zu (2.49) äquivalente Beziehung überzugehen und damit gleichzeitig die Orthogonalität (2.48) sicherzustellen.

Das aufgeschriebene Projektionsverfahren besitzt weitgehende Analogien zu dem ursprünglichen Verfahren für inkompressible Medien [GC90]. Die Systemmatrix des Projektionsschrittes (2.45) ist symmetrisch und spektral äquivalent zum diskreten Laplacian. Ebenso wird die aus der Druckkorrektur (2.42) resultierende Störung der Impulsbilanz gerade durch die Geschwindigkeitskorrektur im instationären Glied aufgehoben.
Die Implementation des Algorithmus erfolgte unter Nutzung der vorhandenen Programmstrukturen im 2D-Programmodul CF2D.
Numerisch bedeutet die Neuberechnung der modifizierten Massenmatrix $\bar{\mathbf{M}}_\chi$ in jedem Zeitschritt eine gewisse, jedoch nur geringfügige, Aufwandserhöhung. Für die Dichte sind zwei neue Vektoren mitzuführen und aufzudatieren. Erste Testergebnisse liegen für den speziellen Anwendungsfall einer Wasserstoffflamme vor.

2.4.2 Teilaufgabe Adaptive FEM auf irregulären hierarchischen Netzen

2.4.2.1 Grundsätzliche Merkmale des FEM-Konzeptes

Folgende Aspekte kennzeichnen das entwickelte Konzept der adaptiven FEM auf irregulären Netzen. Als Modellaufgabe stehe dabei zunächst ein lineares elliptisches Problem zweiter Ordnung im Hintergrund.

- Die FE-Räume werden mittels ungleichmäßiger hierarchischer Basen definiert, weil in diesen Basen die lokale Verfeinerung/Vergröberung der diskreten Funktionsdarstellung gut überschaubar ist. Die allgemeine ungleichmäßige hierarchische Basis wird dabei als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis aufgefaßt.

- Eine hinreichend weite Klasse zulässiger ungleichmäßiger hierarchischer Basen wird festgelegt, innerhalb der ein spezifisch konzipierter Adaptionsprozeß realisierbar ist. Innerhalb dieser Klasse werden als zulässige Basisänderungen im Adaptionsschritt nur solche in Betracht gezogen, die die Netzstrukturen lokal um höchstens ein Level ändern, wobei Basiserweiterung und Basiseinschränkung getrennte elementare Teilschritte des Basisumbaus sind. Der zugehörige Netzumbau ist dann einfach zu organisieren.

- Für die Aufstellung des FE-Gleichungssystems ist die hierarchische Basis bekanntlich ungeeignet, weil die zugehörige Steifigkeitsmatrix nicht schwach besetzt und deshalb bei größeren Knotenzahlen nicht speicherbar ist. Die benutzte ungleichmäßige hierarchische Basis („aktive hierarchische Basis“) ist deshalb in Analogie zum gleichmäßigen Fall in eine FE-Basis mit möglichst schwach besetzter Steifigkeitsmatrix zu transformieren ($\Rightarrow$ „aktive FE-Basis“).

- Die Basisfunktionen dieser FE-Basis können nach der Transformation relativ kompliziert aussehen, so daß das Assemblieren des FE-Gleichungssystems problematisch wird. Die Hinzunahme weiterer, in irregulären Knoten unstetiger hierarchischer Basisfunktionen ($\Rightarrow$ „verfügbare hierarchische Basis“) und deren Transformation ($\Rightarrow$ „verfügbare FE-Basis“) führen auf ein nichtkonformes FEM-Schema, dessen Matrix und rechte Seite mit der üblichen einfachen Assemblierungstechnologie erzeugt werden können und dessen Matrix schwach besetzt ist.

- Das Gleichungssystem des nichtkonformen Schemas kann für die Lösung des ursprünglichen FEM-Gleichungssystems mittels CG-Methode benutzt werden, wenn bei der Iteration der Unterraum der konformen Basisfunktionen nicht verlassen wird. Die dafür verwendete Projektion auf den Unterraum ist in der hierarchischen Basis besonders einfach.

- Der gesamte adaptive Prozeß einschließlich der CG-Schritte (mit Yserentant- oder BPX-Vorkonditionierung) wird in der hierarchischen Basis geführt, nur zur Residuenbildung im iterativen Solver erfolgt eine Transformation in die nichtkonforme „verfügbare FE-Basis“. Prolongation bzw. Restriktion der Näherungslösung bei Basisänderung sind in der hierarchischen Basis trivial.

- Als Fehlerschätzer für die Basiserweiterung werden die Residuen der FEM-Lösung auf denjenigen hierarchischen Basisfunktionen als Testfunktionen herangezogen, die die zulässige Basiserweiterung im Adaptionsschritt definieren („aktivierbare hierarchische Basisfunktionen“), analog bei Basiseinschränkung. Es handelt sich dabei um sogenannte hierarchische Fehlerschätzer im Sinne von Verfürth [Ver93].

- Wird der FE-Raum mittels aller aktivierbaren hierarchischen Basisfunktionen erweitert ($\Rightarrow$ „Monitorraum“) und wird die CG-Methode als Unterraumprozeß im Monitorraum implementiert, so treten die Fehlerschätzer als Komponenten des Residuenvektors auf, mit ihnen kann auch ein CG-Abbruchkriterium formuliert werden.

- Diese adaptive FEM ist auf MIMD-Parallelrechner mit verteiltem Speicher und Botschaftenaustausch effektiv parallelisierbar. Die Kommunikation wird bei vollständig parallelem Assemblieren des FE-Gleichungssystems vorrangig vom CG-Verfahren bestimmt, Basisänderung und Netzumbau verlaufen nach zwischen den Prozessoren kompatibler Auswertung der Fehlerschätzer im wesentlichen parallel.

2.4.2.2 Basen und Adaptivität auf irregulären hierarchischen Netzen

Mit dem Ziel der praktischen Umsetzung des obigen Konzeptes wurden zunächst folgende beiden Begriffsfelder für lineare Dreieckselemente theoretisch erschlossen und zu algorithmisch handhabbarer Form gebracht, wobei gegenüber den Vorarbeiten [Gro95a] weitgehende Änderungen notwendig waren. Wesentliche Elemente dieser beiden Begriffsfelder werden anschließend kurz charakterisiert bzw. dargestellt.

Begriffsfeld *„ungleichmäßige hierarchische Basis“*

- Verfeinerungsgraphen, Transformationsgraph

- zulässige Basis, zulässige Basiserweiterungen/-einschränkungen (über Knoten-Verfeinerungsgraphen definiert)

- ungleichmäßiges hierarchisches Netz als redundanzarme Informationsstruktur zur Basisbeschreibung, adäquate Datenstrukturen

- Algorithmen für Basiserweiterung/-einschränkung, Verwaltung der Datenstrukturen bei Basisänderung

Begriffsfeld *„ungleichmäßige FE-Basis“* :

- Definition und Untersuchung mittels Technik elementarer hierarchischer Transformationen

- Unterscheidung: aktive FE-Basis (definiert FE-Raum), verfügbare FE-Basis (einfache Assemblierung des FEM-Gleichungssystems)

Ausgangssituation:

Den Ausgangspunkt der hierarchischen Basis bildet ein reguläres Dreiecksnetz in Ω („Hauptnetz"), bestehend aus den Mengen seiner Elemente, Kanten, Knoten $\mathcal{E}_0$, $\mathcal{K}_0$, $\mathcal{N}_0$ sowie seine übliche Knotenbasis $\{\hat{\theta}_i^0 \mid i \in \mathcal{N}_0\}$. Das Hauptnetz repräsentiert bei allen Basis- und zugeordneten Netzveränderungen den stationären Netzanteil, die auf das Hauptnetz aufgesetzten, lokal möglicherweise in unterschiedlichem Umfang erzeugten Hierarchielevel bilden den dynamischen Netzanteil, der adaptiv gesteuert werden kann.

Sämtliche weiteren Konstruktionen wurden so angelegt, daß sich später die Elemente des Hauptnetzes bei Nutzung eines MIMD-Parallelrechners und Daten-Parallelisierung durch Gebietszerlegung als Migrationseinheiten für entsprechende Lastausgleichalgorithmen eignen, wobei sich das Gewicht der Elemente für Hauptspeicherauslastung und Aufwand an Rechenoperationen über Baumstrukturen relativ schnell feststellen läßt.

Hierarchische und FE-Basis auf gleichmäßigem hierarchischen Netz:

Nur reguläre Verfeinerungen der Dreieckselemente werden zugelassen (durch geradlinige Verbindung der drei Seitenmittelpunkte). Bei k-maliger reguläre Verfeinerung sämtlicher Elemente vom Hauptnetz aus („gleichmäßige hierarchische Verfeinerung des Levels k") seien $\mathcal{E}_k$, $\mathcal{K}_k$, $\mathcal{N}_k$ die Mengen der beim letzten gleichmäßigen Verfeinerungsschritt neu entstandenen Elemente, Kanten, Knoten und $\mathcal{E}^{(k)}$, $\mathcal{K}^{(k)}$, $\mathcal{N}^{(k)}$ die Mengen *aller* bis dahin erzeugten Elemente, Kanten und Knoten. κ ordne jeder Kante ihr Mittelknoten zu. Mit den üblichen stückweise linearen Knotenfunktionen $\hat{\theta}_i^k$ auf dem Netz des Levels k lassen sich die „gleichmäßige hierarchische Basis des Levels J" $\{\hat{\theta}_i^k \mid i \in \mathcal{N}_k,\ k = 0(1)J\}$ und die „gleichmäßige FE-Basis des Levels J" $\{\hat{\theta}_i^J \mid i \in \mathcal{N}_k,\ k = 0(1)J\}$ angeben.

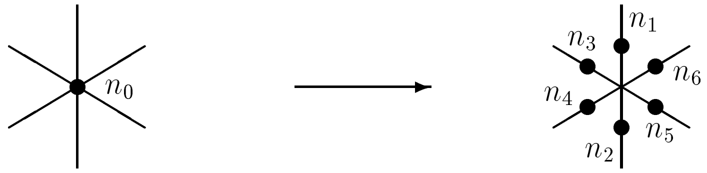
Zur Veranschaulichung der Struktur der hierarchischen Netzverfeinerung und zum besseren Verständnis ungleichmäßiger hierarchischer Basen und Netze, deren Umbau sowie der Transformation hierarchische in FE-Basis wurde das Netzes vom Level J mittels gerichteter Graphen beschrieben. Als Eckenmengen der Graphen fungieren die Mengen aller Elemente $\mathcal{E}^{(J)}$, aller Kanten $\mathcal{K}^{(J)}$ und aller Knoten $\mathcal{N}^{(J)}$ des Netzes vom Level J, die Bogenmengen $B_{\mathcal{E}}^J$, $B_{\mathcal{K}}^J$ und $B_{\mathcal{N}}^J$ werden über die Wirkung der regulären Verfeinerung erklärt, also über die erzeugten Nachfolgermengen. Das gleichmäßige hierarchische Netz vom Level J ist dann hinsichtlich seiner Struktur definiert als Gesamtheit der drei Verfeinerungsgraphen $G_{\mathcal{E}}^J$, $G_{\mathcal{K}}^J$, $G_{\mathcal{N}}^J$ für Elemente, Kanten und Knoten. Elemente- und Kanten-Verfeinerungsgraphen stellen Wälder von Wurzelbäumen dar.

Der für das Begriffsfeld „ungleichmäßigen hierarchischen Basen" wesentliche Knoten-Verfeinerungsgraph bildet eine komplexere Struktur, aus der sich die Verfeinerung in der Umgebung jedes Knotens ablesen läßt:

Knoten-Verfeinerungsgraph des Netzes vom Level J heißt der gerichtete Graph $G_{\mathcal{N}}^{J} = (\mathcal{N}^{(J)}, B_{\mathcal{N}}^{J})$ mit $B_{\mathcal{N}}^{J} \subset \mathcal{N}^{(J)} \times \mathcal{N}^{(J)}$ und

$(n_0, n_1) \in B_{\mathcal{N}}^{J} \quad \Longleftrightarrow$ *Entweder* n_0 ist Hauptknoten und n_1 ist Mittelknoten einer von n_0 ausgehenden Hauptelementkante, *oder* n_0 ist Kantenmittelknoten eines Elementes und n_1 ist Mittelknoten einer von n_0 ausgehenden Teilelementkante, die bei regulärer Verfeinerung dieses Elementes entsteht.

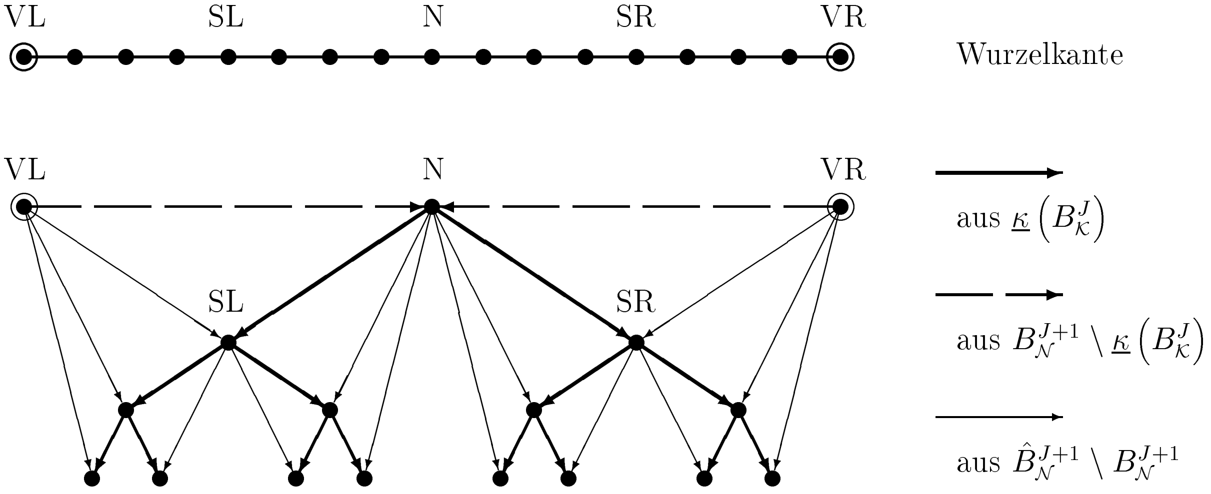
$k > 0$: Kantenmittelknoten n_0 (immer 6 Nachbarn)



Knoten-Verfeinerung, $n_0 \in \mathcal{N}_k$ erzeugt $n_1, n_2, \ldots \in \mathcal{N}_{k+1}$

Die Transformation der hierarchischen Basis in die FE-Basis wird mittels des Transformationsgraphen $\hat{G}_{\mathcal{N}}^{J}$ dargestellt, wobei sich Kanten- und Knoten-Verfeinerungsgraph als Untergraphen des Transformationsgraphen erweisen, was für eine effektive rechentechnische Implementierung nützlich ist

$$G_{\mathcal{K}}^{J} \subset G_{\mathcal{N}}^{J+1} \subset \hat{G}_{\mathcal{N}}^{J+1}.$$



Anteile der Graphen $G_{\mathcal{K}}^{J}, G_{\mathcal{N}}^{J+1}$ und $\hat{G}_{\mathcal{N}}^{J+1}$ auf einer Wurzelkante

Elementare hierarchische Basistransformationen:

Als algebraischer Apparat zur Untersuchung ungleichmäßiger hierarchischer und äquivalenter FE-Basen sowie der zugehörigen FE-Schemata wurde die Technik der elementaren hierarchischen Transformationsmatrizen entwickelt und eingesetzt. Sind $i \in \mathcal{N}^{(J)} \setminus \mathcal{N}_0$, $V1 = V1(i), V2 = V2(i)$ die Väter von i im Transformationsgraphen $\hat{G}^J_{\mathcal{N}}$, $\underline{e}_i \in \mathbf{R}^N$ die Vektoren der kanonischen Basis des $\mathbf{R}^N$ und I die Einheitsmatrix, so heißen *elementare hierarchische Transformationsmatrizen des Knotens* $i \in \mathcal{N}^{(J)} \setminus \mathcal{N}_0$ die folgenden Matrizen T_i, $T_i^{(V1)}$, $T_i^{(V2)} \in \mathbf{R}^{N \times N}$

$$T_i \;=\; I - \tfrac{1}{2}\, \underline{e}_i\, (\underline{e}_{V1}^\top + \underline{e}_{V2}^\top)\,, \qquad T_i^{(Vj)} \;=\; I - \tfrac{1}{2}\, \underline{e}_i\, \underline{e}_{Vj}^\top\,, \quad j = 1, 2.$$

Verschiedene Probleme führen auf die Frage nach der Vertauschbarkeit solcher Transformationsmatrizen, die wie folgt beantwortet werden konnte:

Zwei elementare hierarchische Transformationsmatrizen $T_i = I - \frac{1}{2}\underline{e}_i\,(\underline{e}_{V1(i)}^\top + \underline{e}_{V2(i)}^\top)\,,\ T_j = I - \frac{1}{2}\underline{e}_j\,(\underline{e}_{V1(j)}^\top + \underline{e}_{V2(j)}^\top)$ *mit* $i \neq j$ *sind vertauschbar* ($T_i\,T_j = T_j\,T_i$) *genau dann, wenn* $i \neq V1(j), V2(j)$ *und* $j \neq V1(i), V2(i)$, wenn also keine „Vater–Sohn–Beziehung" zwischen i und j besteht.

Die Transformation der gleichmäßigen hierarchischen Basis in die gleichmäßige FE-Basis des Levels J (Basen als Zeilenvektoren verstanden, worin die Basisfunktionen levelweise aufsteigend geordnet sind) kann dann zum Beispiel dargestellt werden

$$(\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_0}\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_1}\,\ldots\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}\,) \;=\; (\hat{\theta}^0_{\mathcal{N}_0}\,\hat{\theta}^1_{\mathcal{N}_1}\,\ldots\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}\,)\left(\prod_{i\in\mathcal{N}_1} T_i\right)\cdots\left(\prod_{i\in\mathcal{N}_J} T_i\right),$$

wegen der Vertauschbarkeitseigenschaft der Matrizen T_i ist es jedoch nicht notwendig, die elementaren hierarchischen Transformationen nach Levels geordnet und vom unteren zum oberen Level hin auszuführen. Es reicht aus, wenn die zu den Vätern eines Knotens gehörenden Transformationen vor der zum Knoten selbst gehörenden Transformation erfolgen. Diese Bedingung an die Indexreihenfolge wird symbolisch als $V(i) \prec i$ dargestellt,

$$(\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_0}\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_1}\,\ldots\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}\,) \;=\; (\hat{\theta}^0_{\mathcal{N}_0}\,\hat{\theta}^1_{\mathcal{N}_1}\,\ldots\,\hat{\theta}^J_{\mathcal{N}_J}\,) \prod_{\substack{i\in\mathcal{N}^{(J)}\\ V(i)\prec i}} T_i\,.$$

Als Konsequenz brauchen beispielsweise hierarchische Listen für die Basistransformation bei Netzverfeinerung nicht nach Levels umsortiert zu werden, sondern sind einfach fortzuschreiben.

Ungleichmäßige hierarchische Basen und ihr Netz:

Bei ungleichmäßiger hierarchischer Verfeinerung ist die direkte Festlegung einer FE-Basis wegen der irregulären Knoten problematisch, vor allem auch im Hinblick auf eine effektive Assemblierung. Eine für die konforme FEM geeignete ungleichmäßige hierarchische Basis ist als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis jedoch einfach definierbar. Auch Basisänderungen zur Verfeinerung oder Vergröberung der diskreten Lösungsdarstellung lassen sich durch Hinzu- oder Wegnahme hierarchischer Funktionen leicht realisieren. Für die Festlegung und

Veränderung des FE-Raumes im Rahmen irregulärer hierarchischer Netze ist somit die ungleichmäßige hierarchische Basis besser geeignet als eine entsprechende FE-Basis.

Mit Blick auf den FE-Adaptionsprozeß ist deshalb zuerst die ungleichmäßige hierarchische Basis und ein zugehöriges Netz zu definieren. Es bleibt dann das Besetztheitsproblem der entsprechenden Steifigkeitsmatrix und damit die Notwendigkeit des Überganges von der ungleichmäßigen hierarchischen zu einer geeigneten FE-Basis mit schwach besetzter Steifigkeitsmatrix durch geeignete Transformation.

Ist $\mathcal{M}_{(a)}$ eine Knotenmenge mit $\mathcal{N}_0 \subset \mathcal{M}_{(a)} \subset \mathcal{N}^{(J)}$, $J > 0$, und $\mathcal{N}_J \cap \mathcal{M}_{(a)} \neq 0$, dann heißt mit $\mathcal{M}_{k,a} = \mathcal{N}_k \cap \mathcal{M}_{(a)}$ folgende Menge linear unabhängiger Funktionen *die zur Knotenmenge $\mathcal{M}_{(a)}$ gehörende (ungleichmäßige) hierarchische Basis*

$$\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}) = \{ \, \hat{\theta}_i^k \mid i \in \mathcal{M}_{k,a} \, , \; k = 0(1)J \, \}.$$

Die Knoten der Menge $\mathcal{M}_{(a)}$ („aktiven Knoten“) beschreiben die ungleichmäßige hierarchische Basis als Teilmenge der gleichmäßigen hierarchischen Basis des Levels J eindeutig.

Das zur ungleichmäßigen hierarchischen Basis gehörende Netz wird als *redundanzarme* Informationsstruktur verstanden, die zur Beschreibung und Veränderung einer bereits *vor* dem Netz gegebenen ungleichmäßigen hierarchischen Basis nötig ist, wobei verschiedene Basen das gleiche Netz besitzen können. Es muß einerseits geometrische Informationen in elementorientierter Darstellung bereitstellen, die für die Assemblierung des FEM-Gleichungssystems und ggf. die Visualisierung der FEM-Lösung benötigt werden, andererseits Strukturinformationen über die Hierarchien, die für lokale Veränderungen der Basis und hierarchiebezogene Vorkonditionierungen notwendig sind.

Eine entsprechende Netzdefinition konnte in konstruktiver Weise gegeben, werden, indem eine ungleichmäßige hierarchische Zerlegung E des Ausgangsgebietes erzeugt wurde mit den Gesamtmengen der Elemente, Kanten bzw. Eckknoten $\mathcal{E}, \mathcal{K}, \mathcal{M}$ und die Gesamtheit der induzierten gerichteten Graphen

$$G_{\mathcal{E}}[\mathcal{E}] \, , \quad G_{\mathcal{K}}[\mathcal{K}] \, , \quad G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}]$$

als *das zur Basis $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ gehörende hierarchische Netz* verstanden wird. Die Elemente aus E werden seine „aktuellen Elemente“ genannt, die keine aktiven Basisfunktionen tragenden Knoten aus $\mathcal{M}_{(p)} = \mathcal{M} \setminus \mathcal{M}_{(a)}$ „passive Netzknoten“. Aus der Netzkonstruktion ist ableitbar, daß aktive Knoten immer regulär, irreguläre immer passiv sind.

Zulässige hierarchische Basen im Adaptionsprozeß:

Für die Definition der zulässigen Basiserweiterung gibt es verschiedene Möglichkeiten, auch bei Beschränkung des zugehörigen Netzumbaus auf ein Level. Naheliegend und natürlich erschien die Vorstellung, für jede bereits vorhandene lokale Feinheitsstufe der Lösungsapproximation den Übergang zur nächstfeineren zuzulassen, also zu jeder vorhandenen Basisfunktion die Hinzunahme aller noch nicht vorhandenen Basisfunktionen des nächstfeineren Levels aus der unmittelbaren Nachbarschaft zu gestatten, wobei unter unmittelbarer Nachbarschaft die Nachfolgerknoten des Bezugsknotens im Knotenverfeinerungsgraphen zu verstehen sind.

Als „aktivierbare Knoten" wurden deshalb die nicht aktiven unmittelbaren Nachfolger der aktiven Knoten im Knoten-Verfeinerungsgraphen $G_{\mathcal{N}}$ bezeichnet, jede Erweiterung der hierarchischen Basis (in einem Schritt) um hierarchische Funktionen zu aktivierbaren Knoten als „zulässige Basiserweiterung" und Basen, die durch endlich viele aufeinanderfolgende zulässige Basiserweiterungen aus der Hauptnetzbasis $\Theta_a(\mathcal{N}_0)$ erzeugbar sind, als „zulässige Basen". Zulässige Basen $\Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ konnten daher charakterisiert werden als solche, bei denen nur die Hauptknoten im induzierten gerichteten Graphen $G_{\mathcal{N}}[\mathcal{M}_{(a)}]$ keinen Vorgänger besitzen. Die Korrektheit des Begriffes wurde durch weitere Überlegungen untermauert.

Bei Verwendung von 6-Knoten-Dreiecken sind die aktivierbaren Knoten im Algorithmus der Basiserweiterung bereits vor ihrer Aktivierung im Netz verfügbar. Sie können dann im wesentlichen unter Verwendung des Transformationsgraphen bestimmt werden.

In analoger Weise wurden praktikable Begriffe der Deaktivierbarkeit von Knoten und der zulässigen Basiseinschränkung gebildet.

Für die zulässigen Basisänderungen wurden Regeln zur adäquaten Netzänderung abgeleitet. Diese lassen den Schluß zu, daß sich die aus den zulässigen Basisänderungen ergebenden Netzänderungen als Zyklen über der Menge der aktuellen Elemente organisieren lassen, und zwar im Anschluß an die Aktivierung bzw. Deaktivierung des maximal einen erlaubten lokalen Knotenlevels.

Alle hier dargestellten Möglichkeiten wurden in einen entsprechenden Netzgenerator implementiert.

Hierarchische und FE-Basis, aktive und verfügbare Basis:

Als zentraler Mechanismus der FEM auf ungleichmäßigen hierarchischen Netzen wurde das Zusammenwirken von vier Basen herausgearbeitet, die bei der Realisierung des FEM-Schemas und dessen iterativer Lösung eine Rolle spielen. Allen vier Basen liege dabei ein und dieselbe zulässige Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$ zugrunde (als Argument der Basis meist weggelassen). Der FE-Raum wird zunächst durch eine ungleichmäßige hierarchische Basis $\Theta_a = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)})$ beschrieben, die „aktive hierarchische Basis". Für die Einführung weiterer Basen gab es zwei Gründe:

Erstens darf aus Gründen von Speicherökonomie und arithmetischem Operationsaufwand der Vorteil der FEM nicht aufgegeben werden, schwach besetzte Systemmatrizen zu erzeugen. Als elementares Mittel zur Trägerverkleinerung dienen wie im Falle gleichmäßiger hierarchischer Netze die hierarchischen Transformationen, wobei daran natürlich nur vorhandene Basisfunktionen teilnehmen können.

Zweitens darf aus Sicht des algorithmischen Aufwandes nicht auf die einfache Assemblierungstechnik für FEM-Systemmatrix und zugehörige rechte Seite verzichtet werden. Nach der hierarchischen Transformation besitzen die FE-Basisfunktionen unterschiedliche Gestalt, schwer geometrisch beschreibbar und mit komplizierteren Trägerdurchschnitten, so daß die übliche einfache Assemblierungstechnologie für die Steifigkeitsmatrix nicht funktioniert. Dieses Problem wurde bereits in [Gro95a] durch eine geeignete Erweiterung der aktiven hierarchischen Basis um zumeist nichtkonforme Basisfunktionen gelöst, so daß in der zugehörigen erweiterten FE-Basis wieder wie üblich assembliert werden kann. Das FEM-Problem muß dann allerdings in dem durch die aktive hierarchische Basis bestimmten Unterraum gelöst werden.

Die aktive hierarchische Basis wurde daher zur „verfügbaren hierarchischen Basis“ $\Theta = \Theta(\mathcal{M}_{(a)})$ erweitert, indem auch in den regulären passiven Netzknoten die zugehörigen hierarchischen Funktionen zur Basis hinzugenommen werden, während in den irregulären passiven Netzknoten die entsprechenden unstetigen „halben“ hierarchischen Funktionen“ hizuzufügen sind. Ist $I_a \in \mathbf{R}^{N \times N_a}$ die Matrix der Basiseinschränkung auf die aktiven Knoten, so gilt $\Theta_a = \Theta\, I_a$.

Die zu den beiden hierarchischen Basen äquivalente FE-Basen „aktive FE-Basis“ $\Phi_a = \Phi_a(\mathcal{M}_{(a)})$ und „verfügbare FE-Basis“ $\Psi = \Psi(\mathcal{M}_{(a)})$ wurden erklärt als

$$
\begin{aligned}
\Phi_a &= \Phi\, I_a \qquad \text{mit} \\
\Phi &= \Theta\, T_a \qquad \text{und} \\
T_a &= \left(\prod_{i \in \mathcal{M}_{1,a}} T_{i,a}\right) \ldots \left(\prod_{i \in \mathcal{M}_{J,a}} T_{i,a}\right) = \prod_{\substack{i \in \mathcal{M}_{(a)} \\ V(i) \prec i}} T_{i,a}\,, \\
\Psi &= \Theta\, T \qquad \text{mit} \\
T &= \left(\prod_{i \in \mathcal{M}_1} T_i\right) \ldots \left(\prod_{i \in \mathcal{M}_J} T_i\right) = \prod_{\substack{i \in \mathcal{M} \\ V(i) \prec i}} T_i\,,
\end{aligned}
$$

wobei die $T_{i,a}$ nur die aktiven Väter transformieren.

Die Steifigkeitsmatrix zur verfügbaren FE-Basis ist schwach besetzt (maximal lokale Verdopplung der Anzahl der Nebendiagonalelemente gegenüber regulärem Netz). Im allgemeinen ist von den vier Basen nur die verfügbare FE-Basis Ψ zur einfachen Visualisierung entsprechender Funktionen geeignet, weil nur bei ihr der Koeffizientenvektor immer die Funktionswerte in den Knoten enthält (das betrifft nicht die Spezialfälle von [Gro95a], [Bec95], [BR96], wo dies auch für Φ_a gilt).

2.4.2.3 FEM auf irregulären hierarchischen Netzen

FEM-Schemata:

Für die mit den üblichen Voraussetzungen des Lax-Milgram-Lemmas versehene Modellaufgabe im Hilbertraum $V = W_2^1(\Omega)$

$$\overset{*}{u} \in V: \quad a(\overset{*}{u}, v) = f(v) \quad \forall v \in V$$

bieten sich zwei FEM-Schemata an. Bei gegebener Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}$ bestimmen die aktiven Basen einen konformen FE-Raum $\tilde{V}$, die verfügbaren Basen einen i.a. nichtkonformen FE-Raum $\tilde{U}$

$$
\begin{aligned}
\tilde{V} &= \tilde{V}\left(\mathcal{M}_{(a)}\right) = \operatorname{span} \Phi_a = \operatorname{span} \Theta_a \subset V = W_2^1(\Omega)\,, \\
\tilde{U} &= \tilde{U}\left(\mathcal{M}_{(a)}\right) = \operatorname{span} \Psi = \operatorname{span} \Theta \not\subset V, \qquad \text{aber} \quad \tilde{V} \subset \tilde{U}\,.
\end{aligned}
$$

Der FE-Raum $\tilde{V} \subset V$ definiert ein konformes FEM-Schema zur Modellaufgabe sowie für $\mathring{u} = \Phi_a \underline{\mathring{u}}_a$ das zugehörige FEM-Gleichungssystem

$$\mathring{u} \in \tilde{V}: \quad a(\mathring{u}, v) \;=\; f(v) \quad \forall v \in \tilde{V} \quad \text{bzw.} \quad \underline{\mathring{u}}_a \in \mathbf{R}^{N_a}: \quad K_a \underline{\mathring{u}}_a = \underline{f}_a .$$

Können beide Funktionale a, f als Summe entsprechender elementbezogener bilinearer bzw. linearer Funktionale a_e, f_e über $W_2^1(e)$ dargestellt werden,

$$a(u,v) \;=\; \sum_{e \in E} a_e(u_e, v_e) \;=:\; \tilde{a}(u,v)\,, \quad f(v) \;=\; \sum_{e \in E} f_e(v_e) \;=:\; \tilde{f}(v)\,,$$

wobei u_e, v_e die Einschränkungen von u, v auf $e \in E$ bedeuten, so definiert $\tilde{U}$ außerdem ein nichtkonformes Schema zur Modellaufgabe sowie für $\tilde{u} = \Psi\,\underline{\tilde{u}}$ das zugehörige FEM-Gleichungssystem

$$\tilde{u} \in \tilde{U}: \quad \tilde{a}(\tilde{u}, v) \;=\; \tilde{f}(v) \quad \forall v \in \tilde{U} \quad \text{bzw.} \quad \underline{\tilde{u}} \in \mathbf{R}^{N}: \quad K\,\underline{\tilde{u}} = \underline{f}\,.$$

K_a ist positiv definit und bei Symmetrie von a auch symmetrisch, analoges gilt für K, wenn sich V-Elliptizität bzw. Symmetrie von a auf $\tilde{a}$ übertragen. K und $\underline{f}$ sind jedoch im Gegensatz zu K_a und $\underline{f}_a$ einfach zu assemblieren, außerdem ist K schwach besetzt, was sich von K_a nicht immer sagen läßt.

Iterative Löser mit Yserentant- oder BPX-Vorkonditionierung:

Für die Lösung des konformen Schemas wurden zwei Wege untersucht, beide nutzen das Gleichungssystem des nichtkonformen Schemas. Beim ersten Weg wurde dieses Gleichungssystem in das des konformen Schemas transformiert

$$K_a = Q^\top K\,Q\,, \qquad \underline{f}_a = Q^\top \underline{f} \qquad \text{mit} \quad Q = T^{-1}\,T_a\,I_a$$

und mit einem vorkonditionierten CG-Algorithmus in üblicher Form gelöst. Die Transformation Q ist allerdings nur dann weitgehend vereinfachbar und praktikabel, wenn die Aktivierbarkeit der Knoten im engeren Sinne von [Gro95a] definiert wird (aktivierbarer Knoten = passiver Knoten mit zwei aktiven Vätern), vgl. dort Technik und Resultate. Die Transformation Q erfordert dann nur noch die elementaren Transformationen in den passiven Knoten

$$Q \quad = \quad \left(\prod_{\substack{i \in \mathcal{M}_{(p)} \\ i \prec V(i)}} T_i^{-1} \right) I_a\,.$$

Als günstiger Spezialfall von [Gro95a] kann auch das Vorgehen in [Bec95], [BR96] betrachtet werden. Im allgemeinen empfiehlt sich obige Transformation der Steifigkeitsmatrix jedoch nicht, weil bei expliziter Ausführung von T^{-1} die Matrix in der hierarchischen Basis eine nicht speicherbare Zwischenstufe bildet. Weiterhin spricht gegen diesen Weg, daß K_a und $\underline{f}_a$ bei Basisänderungen im adaptiven Prozeß ohne Rücktransformation oder zusätzliche Speicherung von K und $\underline{f}$ nicht aufdatiert werden können.

Beim zweiten Weg wurde der iterative Lösungsalgorithmus für das konforme Schema in die Basis Ψ transformiert, um zur Defektberechnung K und $\underline{f}$ heranziehen zu können. Das CG-Verfahren für das Gleichungssystem $K_a\,\mathring{\underline{u}}_a = \underline{f}_a$ des konformen FEM-Schemas in der Basis Φ_a bei Verwendung der hierarchischen Vorkonditionierung ist dann äquivalent zum CG-Verfahren für das Gleichungssystem $K\,\tilde{\underline{u}} = \underline{f}$ des nichtkonformen FEM-Schemas in der Basis Ψ bei modifizierter Verwendung der zu diesem Schema gehörenden hierarchischen Vorkonditionierung als $T^{-1}\,(K^0\,)^{-1}\,P_a\,T^{-\top}$ mit zwischengeschalteter Projektion P_a. Dabei ist $P_a = I_a\,I_a^\top$ Orthoprojektor in $\mathbf{R}^N$ und besitzt eine extrem einfache Gestalt, bei der Projektion sind nur die Koeffizienten in den passiven Knoten auf null zu setzen. Bei ausgeschalteter Projektion wird die Lösung des nichtkonformen Schemas ermittelt.

Bei Verwendung des CG-Verfahrens mit BPX-Vorkonditionierung und analoger Transformation in die Basis Ψ bleibt wiederum die algorithmische Gestalt des CG erhalten, die Vorkonditionierung wandelt sich aber zu

$$C^{-1} \;=\; T^{-1}\left(\sum_{j=0}^{J} T_{(1,a)}\,\ldots\,T_{(j,a)}\;P_a^{(j)}\;T_{(j,a)}^\top\,\ldots\,T_{(1,a)}^\top\right)T^{-\top}\,,$$

wobei $T_{(k,a)}$ die hierarchische Transformation des Levels k ist. Die Anwendung von C^{-1} erfordert neben der Akkumulation der Summanden einen Aufwand äquivalent zu zwei Transformationen T und zwei Transformationen T_a. Die höhere geometrische Variabilität im Allgemeinfall der hier benutzten ungleichmäßigen hierarchischen Basen muß also durch einen zusätzlichen Aufwand bei der BPX-Vorkonditionierung erkauft werden, der zu zwei Transformationen T_a pro Iterationsschritt äquivalent ist.

2.4.2.4 Adaptive FEM auf irregulären hierarchischen Netzen

Die oben dargestellten Grundzüge des adaptiven FEM-Konzeptes wurden für das elliptische Problem mit nachfolgend beschriebenen Strukturbestandteilen verwirklicht und programmtechnisch implementiert. Technologische Absicht war es dabei, die hierarchischen Fehlerschätzer im Rahmen der Residuenberechnung des Iterationsverfahrens mit zu ermitteln und zunächst für die Abbruchentscheidung des Iterationsverfahrens einzusetzen, bevor sie danach für den Entscheid über die Basisänderung zur Verfügung stehen. Für die Yserentant-Vorkonditionierung konnte die Berechnung des vorkonditionierten Residuums und gleichzeitig der Fehlerschätzer in einem einheitlichen Schritt - auch hinsichtlich der Inter-Prozessor-Kommunikation auf dem Parallelrechner - realisiert werden.

Schema der benutzten Basen und Räume: (für die Verfeinerung)
Ausgehend von der aktiven hierarchischen Basis $\Theta_a = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}$ zur aktuellen Menge aktiver Knoten wird durch die zugehörige Menge aktivierbarer Knoten $\Delta\mathcal{M}_{(a)}^+$ die im nächsten Erweiterungsschritt maximal mögliche Menge aktiver Knoten $\mathcal{M}_{(a)}^+ = \mathcal{M}_{(a)}) \cup \Delta\mathcal{M}_{(a)}^+$ festgelegt, die zugehörige Menge von Netzknoten $\mathcal{M}^+$ sowie zugehörige aktive hierarchische Basis $\Theta_a^+ = \Theta_a(\mathcal{M}_{(a)}^+)$, zugehörige verfügbare hierarchische Basis $\Theta^+ = \Theta(\mathcal{M}_{(a)}^+)$ und zugehörige verfügbare FE-Basis $\Psi^+ = \Psi(\mathcal{M}_{(a)}^+)$. Diese Basen spannen die im Algorithmus benutzten Räume auf

$$\tilde{V} \;=\; \operatorname{span}\Theta_a\,, \qquad \tilde{V}^+ \;=\; \operatorname{span}\Theta_a^+\,, \qquad \tilde{U}^+ \;=\; \operatorname{span}\Theta^+ \;=\; \operatorname{span}\Psi^+\,.$$

Mittels des FE-Raumes $\tilde{V}$ wird das konforme FE-Problem definiert, der „Monitorraum“ $\tilde{V}^+$ enthält zusätzlich die zur Berechnung der Fehlerschätzer η_i notwendigen Testfunktionen ϕ_i

$$\eta_i \;=\; a(u,\theta_i) - f(\theta_i)\,, \qquad u \in \tilde{V}\,, \quad \theta_i \in \Theta_a^+ \setminus \Theta_a\,, \;\; \text{d.h.} \;\; i \in \Delta\mathcal{M}_{(a)}^+\,,$$

im „Assemblierraum“ $\tilde{U}^+$ wird das in der FE-Basis Ψ^+ assemblierbare Gleichungssystem ($\Rightarrow\; K^+\,,\, \overset{+}{\underline{f}}{}^+$) des nichtkonformen FE-Problems in $\tilde{U}^+$ erzeugt. Der Übergang zwischen den Koeffizientenvektoren in den hierarchischen Basen $\Theta^+\,,\, \Theta_a^+\,,\, \Theta_a$ erfolgt trivialerweise durch das Herausstreichen der Koeffizienten (Projektion) bzw. das Auffüllen mit Nullen (Prolongation), der Übergang von Θ^+ nach Ψ^+ mittels der entsprechenden hierarchischen Transformation $(T^+)^{-1}$ bzw. zurück für Funktionale (wie den Defekt) mittels $(T^+)^{-\top}$.

Vorkonditionierter CG-Algorithmus:
Realisiert wird der CG für das konforme FE-Problem in $\tilde{V}$ bei Darstellung in der hierarchischen Basis Θ_a, in der auch die Koeffizientenvektoren von Näherungslösung und Suchrichtung, $\underline{\underline{u}}_a$ und $\underline{\underline{s}}_a$, iteriert werden. Die Näherungslösung wird in die FE-Basis Ψ^+ transformiert ($\underline{u}_{(a)}^+$) – ist in dieser Form auch zur Visualisierung geeignet – und wird dort mittels Berechnung von $K^+\,\underline{u}_{(a)}^+$ zum Aufdatieren des Defektes $\overset{+}{\underline{\underline{r}}}{}_a^+$ in Basis Θ_a^+ genutzt. Die hierarchische Vorkonditionierung des Defektes zu $\overset{+}{\underline{\underline{w}}}{}_a^+$ wird durch den zweimaligen Basiswechsel zwischen Θ^+ und Ψ^+ automatisch mit vollzogen, bis auf den ggf. dabei noch anzuwendenden Grobgitterlöser. $\overset{+}{\underline{\underline{r}}}{}_a^+\,,\, \overset{+}{\underline{\underline{w}}}{}_a^+$ enthalten dann explizit sowohl die Defekte $\underline{\underline{r}}_a\,,\, \underline{\underline{w}}_a$ des ursprünglichen CG in Basis Θ_a, als auch die Fehlerschätzer η_i in den Knoten $i \in \Delta\mathcal{M}_{(a)}^+$. Das Aufdatieren von Näherungslösung und Suchrichtung erfolgt wie üblich.

CG-Abbruchkriterium und Netzverfeinerung:
Die Fehler der CG-Näherung u in der energetischen Norm bezüglich der FEM-Lösung $\mathring{u}$ in $\tilde{V}$ bzw. der FEM-Lösung $\hat{\mathring{u}}$ in einem umfassenderen Raum $\tilde{V}^\diamond = \operatorname{span}\Theta_a^\diamond$ erfüllen die Orthogonalitätsbeziehung

$$\|u - \hat{\mathring{u}}\|_a^2 \;=\; \|u - \mathring{u}\|_a^2 \;+\; \|\mathring{u} - \hat{\mathring{u}}\|_a^2\,.$$

Wird eine erweiterte aktive Basis $\Theta_a^\diamond$ mit $\Theta_a \subset \Theta_a^\diamond \subset \Theta_a^+$ gewählt, so lassen sich diese Fehler in den zur energetischen Norm $\|.\|_a$ äquivalenten energetischen Matrixnormen von $K_a\,C_a^{-1}\,K_a$ bzw. $K_a^\diamond\,(C_a^\diamond)^{-1}\,K_a^\diamond$ durch die berechenbaren Skalarprodukte $\Delta(\Theta_a)^2 \;=\; (\underline{\underline{r}}_a)^\top\,\underline{\underline{w}}_a$ und $\Delta(\Theta_a^\diamond)^2 \;=\; (\overset{\diamond}{\underline{\underline{r}}}{}_a^\diamond)^\top\,\overset{\diamond}{\underline{\underline{w}}}{}_a^\diamond$ angeben. Für diese wurde im Falle der Yserentant-Vorkonditionierung $C_a\,,\, C_a^\diamond$ eine zur Orthogonalitätsbeziehung ähnliche Eigenschaft nachgewiesen

$$\Delta(\Theta_a^\diamond)^2 \quad=\quad \Delta(\Theta_a)^2 \;+ \sum_{i \in \Delta\mathcal{M}_{(a)}^\diamond} \eta_i^2 \qquad \text{für alle} \;\; \Theta_a \subset \Theta_a^\diamond \subset \Theta_a^+\,.$$

In dieser Gleichung entkoppeln sich die Wirkungen der Hinzunahme einzelner Basisfunktionen aus $\Theta_a^+ \setminus \Theta_a$ auf den „Fehler“, was insbesondere die Rolle der η_i als Fehlerschätzer bestätigt. Die Gleichung wurde deshalb für die Formulierung zweier parametrisierter Kriterien genutzt, wobei der Monitorraum die Rolle des praktisch nicht verfügbaren Gesamtraumes übernimmt:

Abbruchkriterium für den CG:
Abbruch der Iteration, sobald $\Delta(\Theta_a^+)^2 - \Delta(\Theta_a)^2$ den wesentlichen Anteil von $\Delta(\Theta_a^+)^2$ bildet.

Auswahlkriterium für die Verfeinerung:
Auswahl von $\Theta_a^\diamond \subset \Theta_a^+$ so, daß mit möglichst kleiner Menge $\Delta\mathcal{M}_{(a)}^\diamond$ ein möglichst großer Anteil des „Fehlers" $\Delta(\Theta_a^\diamond)^2$ erfaßt wird.

Für die Netzvergröberung wurden ähnliche, noch nicht abgeschlossene Vorstellungen entwickelt.

Sonderfall letztes Netz:
Auf dem letzten Netz, d.h. wenn aus Speicherplatzgründen keine nachfolgende Basiserweiterung mehr zulässig ist, werden die Defekt-Projektion in $\tilde{V}$ und das Abbruchkriterium abgeschaltet und es wird in der Basis Θ_a^+ weiteriteriert. Damit wird schließlich das FE-Problem im letzten Monitorraum $\tilde{V}^+$ gelöst und so die volle Information der verfügbaren Daten K^+, $\overset{+}{\underline{f}}{}^+$ ausgeschöpft.

Nachfolgend wird ein Überblick über den algorithmischen Ablauf der implementierten parallelen adaptiven FEM gegeben, wobei Technik und Position des Assemblierens noch nicht abschließend festgelegt wurden.

	Aktion	Modul	Speicher-umbau	Kommu-nikation
	Netztransformation	DisplArr TransArr		
	Kettenkommunikation vorbereiten	KettAkk_Vor		E
	Grobgittermatrix erzeugen			
	Kettenmuster erzeugen Kettenkommunikation öffnen	SetKetNod Set_K2		E E
	Startvektor Hauptnetz	VecStart		I
⇒	Typtransfer NL,SR: $N \longrightarrow K_1$ Abstimmung NL in Koppelknoten	VecStart VecStart		I I
	Systemmatrix expandieren		□	I
	Assemblieren GS in Basis Ψ^+	Assemh		I
	Systemmatrix komprimieren		□	I
	CG-Solver	PPCGh		I
	Aktivierungsentscheidung/-mark. Deaktivierungsentscheidung/-mark. (kompatibel zu Akt.entscheidung)	DecAct DecDeact		I I I
	Visualisierung — fakultativ! (Transformation in Ψ^+)	VisPre		I I
	Typtransfer NL,SR: $K_1 \longrightarrow N$	VecExp1		I
	Kettenkommunikation schließen De-/Aktivierbarkeitsmarker löschen	NetBegin NetBegin		L
	Deaktivieren von Basisfunktionen NL,SR auf neues Netz Netzvergröberung incl. Knoten löschen Netzdaten aktualisieren 1	BasDeact VecCoars NetCoars GapNode NetClose		
	Netzstrukturen expandieren		□	
	Aktivieren von Basisfunktionen Netzverfeinerung incl. Knoten erzeugen NL,SR auf neues Netz Netzdaten aktualisieren 1	BasAct NetFiner LocNode VecFiner NetClose		
	Netzstrukturen komprimieren		□	
	De-/Aktivierungsmarker löschen	DecErase		
⇐	Aktivierbarkeit markieren Kettenmuster erzeugen Kettenkommunikation öffnen Netzdaten aktualisieren 2 Deaktivierbarkeit markieren	NetEnd NetEnd, SetKetNod NetEnd, Set_K2 NetEnd NetEnd		 E E E E E I

Kommunikation: E=Möglichkeit erzeugen, L=löschen, I=möglich, sonst nicht möglich
Abkürzungen: NL=Näherungslösung, SR=Suchrichtung, N,K_i= Speicherformen

2.4.2.5 Parallelisierung der adaptiven FEM

Die betrachtete FEM-Technik wurde für die Anwendung auf MIMD-Parallelrechnern mit verteiltem Speicher und Botschaftenaustausch umgesetzt bei Zerlegung des Ausgangsgebietes in paarweise disjunkte Teilgebiete (nichtüberlappende Gebietszerlegung) und deren Abbildung auf die p Prozessoren P_s, wobei die Teilgebiete separat so vernetzt werden, daß das resultierende Netz regulär ist.

Das für diese Problematik von MEYER [Mey90] entwickelte Konzept des CG-Algorithmus beruht auf zwei unterschiedlichen lokalen Speichertypen von Vektoren, die einerseits den Vektoren der Unbekannten entsprechen (Typ I: Näherungen, Korrekturen, Suchrichtungen), andererseits den linearen Funktionalen in der Variationsformulierung des diskreten Problems (Typ II: rechte Seiten, Defekte). Es wurde in angepaßter Form ohne Probleme übertragen. Das lokale Assemblieren des FE-Gleichungssystems in der verfügbaren FE-Basis geschieht auf Prozessor P_s mit der üblichen Technik unter Verwendung der lokalen Menge aktueller Elemente und damit auch hier ohne Kommunikation. Die Verwendung der Speichertypen I und II für die Vektoren erfolgt völlig analog zur Vorgehensweise auf dem regulären Netz, unabhängig davon, in welcher Basis die Vektoren dargestellt sind. Entsprechend werden pro Iterationsschritt wieder zwei globale Kommunikationen zum Aufsummieren der lokalen Skalarprodukte notwendig sowie eine Kommunikation mit den Nachbarprozessoren zum Typwechsel von II zu I während der hierarchischen oder BPX-Vorkonditionierung.

Letztere ist eine Kommunikation nur über die Werte in den aktiven Koppelknoten, da der Algorithmus in dem von der aktiven hierarchischen Basis erzeugten Unterraum abläuft. In den passiven Knoten auf den Koppelkanten brauchen die Netze benachbarter Prozessoren nicht kompatibel zu sein! Die Kompatibilität der lokalen Netze in den aktiven Koppelknoten muß durch kompatible Aktivierungs- bzw. Deaktivierungsentscheidungen mittels der durch Kommunikation abzustimmenden Fehlerschätzer gewährleistet werden. Vorteilhaft ist, daß auch die Ermittlung der aktivierbaren Knoten als kantendeterminierter Prozeß rein lokal abläuft, was bei der Bestimmung der deaktivierbaren Knoten nicht der Fall ist. Die Übersicht über den Ablauf des Adaptionsprozesses macht jedoch deulich, daß der gesamte Netzumbau im wesentlichen parallel abläuft.

Literatur zu 2.4/(eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum)

[Gro95a] U. Groh
Ein technologisches Konzept zur Erzeugung adaptiver hierarchischer Netze für FEM-Schemata.
Preprint SPC 95_6, Techn. Univ. Chemnitz 1995.

[Gro95b] U. Groh
FEM auf irregulären hierarchischen Dreiecksnetzen.
In: Proceedings, Workshop über „Parall. wiss. Rechnen in FEM und BEM“, Chemnitz, 27.09. – 30.09.1995

[Gro97] U. Groh
FEM auf irregulären hierarchischen Dreiecksnetzen.
Preprint SFB 97_5, Techn. Univ. Chemnitz 1997.

[Gro98] U. Groh
Arbeitstitel:*Eine adaptive FEM für elliptische Probleme auf irregulären hierarchischen Dreiecksnetzen.*
Preprint-Reihe des SFB 393, erscheint 1998

[Isr95] C. Israel
NETGEN69 - Ein hierarchischer paralleler Netzgenerator.
Preprint SPC 95_26, Techn. Univ. Chemnitz 1995.

[Mei96a] S. Meinel
Simulation komplexer Strömungsvorgänge.
Eröffnungskolloquium des SFB 393, Chemnitz, 30.01.1996.

[Mei96b] S. Meinel
Probleme der Simulation komplexer Strömungsvorgänge unter Einbeziehung von Parallelrechnern.
Jahrestagung der DMV 1996, Jena, 15.–23.09.1996.

[Mei98] S. Meinel
Modifiziertes Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl
Preprint SFB 98-12, in Vorbereitung

[MMG95] A. Meyer, S. Meinel, U. Groh
Parallel finite element simulation of coupled flow problems.
In: Knop, Schreiber (Eds.); Power Explorer User Report, Second Edition, 144-150, Düsseldorf 1995.

[MM96] A. Meyer, S. Meinel
Effiziente parallele Finite Elemente Rechnungen von Strömungs- und Transportvorgängen.
Vortrag Universität Kaiserslautern, Institut für Technomathematik 12.11.1996.

[Pes97a] S. Meinel, M. Pester
Examples for animated solutions of flow simulations.
`http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls.html`

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Aus dem im Abschnitt (2.4) dokumentierten Bearbeitungsstand leiten sich eine ganze Reihe von dringenden Aufgaben für die weitere Arbeit ab.
Im Vordergrund steht das Problem, die in Abschnitt (2.4.2) entwickelten adaptiven Techniken in den Algorithmus zur Strömungssimulation zu integrieren. Dies kann vorerst nur für ebene Probleme unter Verwendung von Dreiecksnetzen erfolgen. Offensichtlich muß daher an der Verallgemeinerung der adaptiven Technik für Viereckselemente und räumliche Diskretisierungen gearbeitet werden.
Im Zusammenhang mit der Realisierung eines adaptiven Algorithmus der Simulation von Strömungs- und Transportproblemen entstehen eine Reihe von Fragen, die zur Zeit noch ungelöst sind:
Es ist notwendig, eine adäquate Datenstruktur aufzubauen, die den komplexen Problemstellungen gerecht wird, effektive Verarbeitung der Matrizen und Vektoren erlaubt und auch einfache Strategien der dynamischen Lastbalancierung ermöglicht. Die der Lastbalancierung zugrunde liegende Neuaufteilung des Lösungsgebietes soll unter Einbeziehung der Ergebnisse des Teilprojektes A3 erfolgen. Bedingt durch die Inhomogenität von gekoppelten Problemstellungen steht auch die Frage, an welchen physikalischen Größen (Geschwindigkeit, Druck, Temperatur,...) die Verfeinerungs- und Vergröberungsentscheidungen im Adaptionsprozeß zu orientieren sind. Ist unter Umständen sogar die Arbeit mit unterschiedlichen, auf das Teilproblem bezogenen Gittern angezeigt?
Einen weiteren Schwerpunkt für die Weiterentwicklung des Programmsystems stellt die Einbeziehung der Simulation turbulenter Strömungen dar. Hiermit wird ein Haupthindernis für die adäquate Behandlung vieler Anwendungsprobleme beseitigt und gleichzeitig auch die Grundlagen für die geplante Nutzung des Algorithmus bei der Simulation disperser Mehrphasenströmungen (siehe Tp. D2) gelegt.
Parallel zu den genannten Schwerpunkten sind weitere Untersuchungen und Erweiterungen des Algorithmus hinsichtlich der Stabilisierungstechnik für das Strömungsproblem zu Fragen der Vorkonditionierung von Aufgaben mit starkem Konvektionsanteil erforderlich.