

2.1 Teilprojekt D3

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

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Arnd Meyer
Technische Universität Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Professur Numerische Analysis

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr.-Ing. Stefan Meinel
Technische Universität Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Lehrstuhl für Numerische Analysis

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die grundlegende Zielstellung des Projektes ([Mey98b]) bestand im weiteren Ausbau der in (parallelen) Experimentalprogrammen (CF3D, CF2D) implementierten Algorithmen zur Simulation gekoppelter Strömungs- und Transportvorgänge. Aufbauend auf den Ergebnissen der vorangegangenen Projektphase ([Mey98a]) sollte sich die Untersuchungen und Entwicklungen auf folgende Schwerpunkte konzentrieren:

- Übertragung adaptiver Verfahren auf die Algorithmen zur Strömungssimulation. Ausgangspunkt hierfür sollten die in Entwicklung befindlichen adaptiven Verfahren aus dem Teilprojekt A3 für elliptische Modellgleichungen sein.
- Entwicklung eines Programmzweiges zur Simulation von turbulenten Strömungen, modelliert mit dem $k - \varepsilon$ - Modell.
- Exemplarische Behandlung von komplexen 3D-Testbeispielen mit dem Ziel, die Genauigkeit, Effizienz und Robustheit der eingesetzten Verfahren nachzuweisen und Rückschlüsse auf notwendige Weiterentwicklungen der Algorithmen, der Gleichungslöser und der Kommunikationsschnittstelle zu ermöglichen.

Die vorgesehenen Aufgabenstellungen wurden im Berichtszeitraum nur in erheblich eingeschränktem Umfang bearbeitet.

Im Bewilligungsschreiben der DFG vom 2.12.1998 wurde eine Neuausrichtung der

Forschungsarbeiten angeregt, die auf die Kopplung der vorher in den Projekten D1 (Festkörperdeformation) und D3 bearbeiteten Fragestellungen abzielte. Um eine gewisse Abgrenzung und Spezifizierung dieser äußerst vielschichtigen Problematik vorzunehmen, waren umfangreiche Recherchen vorliegender Arbeiten aus der Literatur und der Kontakt mit anderen Forschungsgruppen und Anwendern erforderlich. Die angestellten Überlegungen und Voruntersuchungen mündeten in eine Projektskizze, die der DFG am 4.10.1999 zugeleitet wurde. Die in der Skizze vorgeschlagene Modifizierung des Arbeitsplanes wurde von den Gutachtern jedoch nicht bestätigt, es erfolgte keine Freigabe der Fördermittel für die Jahre 2000/2001 und die Bearbeitung des Projektaufgaben konnte daher nach dem 31.12.1999 nicht weitergeführt werden.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Die Arbeiten des Jahres 1999 konzentrierten sich auf folgende Fragen:

- Weiterführende Untersuchungen und Zusammenfassung der Ergebnisse zur Problematik der Strömungssimulation für dichteveränderliche Medien ([Mei00]).
- Recherche zur Thematik „Kopplung Fluidströmung - Festkörperdeformation“ und Ausarbeitung einer Projektskizze ([Mey99])
- Weiterentwicklung und Testung des 3D-Experimentalsystemes anhand des DFG - Strömungsbenchmarks und anderer Testobjekte

Die Untersuchung von Strömungen mit veränderlicher Dichte, jedoch niedriger Machzahl, bildete einen unverzichtbaren Baustein auf dem Wege der Erarbeitung eines Simulationssystemes für gekoppelte Strömungs- und Transportprozesse. Wichtige Anwendungsproblemklassen, insbesondere die Simulation von Verbrennungsvorgängen, erscheinen ohne diese Modellerweiterung nicht behandelbar.

Die Tatsache, dass zwischen den traditionell deutlich getrennten Verfahrensklassen der kompressiblen und der inkompressiblen Strömungen der Berechnung von Strömungen mit niedriger Machzahl eine besondere, bisher weitgehend unterschätzte Bedeutung zukommt, wurde etwa zeitgleich auch von anderen Forschungsgruppen wahrgenommen (siehe [BR98], [GKMR96], [LG96], [Hori92]).

Die vorgesehene Erweiterung des von uns bevorzugten Druckiterationsverfahrens zur Entkopplung des instationären Strömungsproblems auf Vorgänge mit Dichteänderlichkeit, die 1996/97 als Teilaufgabe in Angriff genommen wurde, erwies sich als deutlich problematischer als zunächst angenommen. Die Ursache hierfür liegt in einer numerischen Instabilität, die durch die notwendige Berücksichtigung der Zeitableitung der Dichte in das Projektionsverfahren eingeschleppt wird und deren theoretische Aufklärung nach unserer Kenntnis erstmals in [VTM99] gelungen ist.

Die von den DFG-Gutachtern nachdrücklich angeregte Hinwendung zu Problemen der Fluid-Festkörper-Kopplung erforderte eine intensive Literaturrecherche zu diesem von uns bisher nicht bearbeiteten Problemkreis. Mit Forschungsgruppen aus den Sonderforschungsbereichen 379 und 404 konnten Interessenten und Gesprächspartner für diese anspruchsvolle Aufgabe gefunden werden.

Für die auf der Seite der Strömungsmechanik kurz- und mittelfristig zu lösenden Aufgaben wurde ein relativ detaillierter Arbeitsplan erstellt. Kernpunkt hierbei war die Umsetzung des ALE(arbitrary-Lagrange-Euler)-Konzeptes in dem bestehenden Algorithmus. Vorarbeiten hierfür sind bereits erfolgt und flossen u.a. in die Simulation mikromechanischer Strömungen mit bewegten Wänden (siehe z.B. [DSMMDKB98]) ein.

Eine Schlüsselstellung in den vorgesehenen Forschungsarbeiten nahmen auch Überlegungen zum Kopplungsverhalten der Feldprobleme für das Fluid und für die Festkörperdeformation ein. Die Frage der Konvergenz der Iteration der gekoppelten Rechnung stellt sich vor allem bei bestimmten kritischen Konstellationen von Fluidviskosität und Festkörpersteifigkeit. Neben weiteren interessanten Ansätzen aus der Fachliteratur (siehe z.B. [SAW97]) verdient hierbei, aus unserer Sicht, vor allem die im SFB 404 entwickelte Methodik unter Verwendung eines globalen Gradientenverfahrens ([WMR99]) Beachtung. Eine genauere Ausgestaltung und Bewertung dieser Fragestellungen könnte jedoch erst in einem fortgeschritteneren Stadium der Forschungsarbeit vorgenommen werden.

Im Jahre 1999 sollte die Implementierung und Testung des 3D-Programmmodules planmäßig zu einem vorläufigen Abschluss gebracht werden. Diese Arbeiten wurden wesentlich beeinträchtigt durch die unzureichenden Hardwareressourcen des verfügbaren Parallelrechners (Parsytec GC PowerPlus) und dessen Totalausfall ab August 1999. Es erfolgte die Umsetzung der Programmpakete auf linuxbasierte Systeme, wodurch auch die Betrachtung von Testbeispielen von realitätsbezogener Größe möglich wurde.

Literaturverzeichnis

- [BR98] M. Braak, R. Rannacher
Adaptive finite element methods for low-Mach-number flows with chemical reactions
Lecture Series 1999-03, v. Karman Institute, 1999.
- [DSMMDKB98] R. Dudek, A. Schubert, S. Meinel, B. Michel, L. Dorfmueller, P.M. Knoll, J. Baumbach
Flow characterization and thermo-mechanical response of anisotropic conductive films
Proc. Third Int. Conf. on Adhesives in Electronics, Binghamton, NY, Sept. 28-30, p. 68-75, 1998.
- [GKMR96] K.J. Geratz, R. Klein, C.D. Munz, S. Roller
Multiple Pressure Variable (MPV) approach for low Mach number flows based on asymptotic analysis
Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 52, Vieweg 1996.

- [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.
- [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
- [Mey98a] A. Meyer
Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD-Parallelrechnern.
Zwischenbericht zum Teilprojekt D3, Zeitraum 1996 – 1998, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 1998.
- [Mey98b] A. Meyer
Effiziente numerische Algorithmen zur Simulation komplexer strömungsmechanischer Aufgaben auf MIMD-Parallelrechnern.
Finanzierungsantrag zum Teilprojekt D3, Zeitraum 1999 – 2000, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 1998.
- [Mey99] A. Meyer
Projektskizze zum Teilprojekt D3, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 4.10.1999.
- [Mei00] S. Meinel
Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche Strömungen mit niedriger Machzahl
Preprint SFB 00-16, März 2000
- [ST96] M. Schäfer, S. Turek
Benchmark Computation of Laminar Flow Around a Cylinder
Preprint 96-03 des SFB 359, Universität Heidelberg 1996.
- [SAW97] S.D. Senturia, N. Aluru, J. White
Simulating the Behavior of MEMS devices: Computational method and needs
IEEE Comp. Sci. & Engng., 30-42, 1997.
- [VTM99] B. Van't Hof, J.H.M. Ten Thije Boonkamp, R.M.M. Mattheij
Pressure Correction for laminar combustion
Combust. Sci. and Tech., Vol. 149, 201–223, 1999.
- [WMR99] W.A. Wall, D.P. Mok, E. Ramm
Partitioned analysis approach for the transient, coupled response of viscous fluids and flexible structures
In: ECCM'99 - Proc. European Conf. on Comp. Mech., Munich, 1999.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Strömungen mit niedriger Machzahl

Die Ergebnisse sind in [Mei00] ausführlich dargestellt und algorithmisch im 2D-Programmsystem CF2D implementiert. Eine Animation der schwerkraftgetriebe-

nen Durchmischung zweier Gase mit stark unterschiedlichen Dichten kann im Internet unter [MP99] abgerufen werden.

2.4.2 Teilaufgabe Kopplung Fluid-Festkörper

siehe Projektskizze [Mey99]

2.4.3 Teilaufgabe Testung CF3D

Es wurde ein Anzahl von Testbeispielen untersucht, um in erster Linie bestehende Fehler und Defizite im Programmpaket zu lokalisieren und zu beheben. Zur Validierung wurde u.a. der DFG-Strömungsbenchmark ([ST96]) herangezogen, wobei FEM-Netze von ca. 300000, 2.3 Mill. und 24 Mill. Knotenpunkten zum Einsatz gelangten. Die Anströmungs-Reynoldszahl wurde auf einen Wert von $Re = 200$ eingestellt, um deutlich instationäre Strömungsverhältnisse zu bewirken. Auf der Basis der außerordentlich feinen Diskretisierung, konnten interessante und hochkomplexe Details der Strömung sichtbar gemacht werden. Eine vollständige Periodizität der Wirbelbewegung wurde auch nach einer Simulationszeit von ca. 25 s nicht festgestellt (siehe auch [MP99]). Die vorliegenden Ergebnisse dieser Untersuchungen, die auf einem CLIC-Teilcluster mit 128 Pentium-III-Prozessoren erzielt wurden, konnten bei der Inbetriebnahme des Chemnitzer LINUX-Clusters ([Mei00a]) gezeigt werden.

Literaturverzeichnis

- [DSMMDKB98] R. Dudek, A. Schubert, S. Meinel, B. Michel, L. Dorfmueller, P.M. Knoll, J. Baumbach
Flow characterization and thermo-mechanical response of anisotropic conductive films
Proc. Third Int. Conf. on Adhesives in Electronics, Binghamton, NY, Sept. 28-30, p. 68-75, 1998.
- [Mey99] A. Meyer
Projektskizze zum Teilprojekt D3, DFG-Sonderforschungsbereich 393 TU Chemnitz, 4.10.1999.
- [MP99] S. Meinel, M. Pester
Examples for animated solutions of flow simulations.
<http://www.tu-chemnitz.de/~pester/exmpls.html>
- [Mei98] S. Meinel
Untersuchungen zur Strömungssimulation auf dem Parallelrechner
Chemnitzer FEM-Symposium, TU Chemnitz, 7.9-9.9.1998.
- [Mei99] S. Meinel
Untersuchungen zur Strömungssimulation im Teilprojekt D3
Seminar des SFB 393, TU Chemnitz, Januar 1999.
- [Mei00] S. Meinel
Untersuchungen zu Druckiterationsverfahren für dichteveränderliche

Strömungen mit niedriger Machzahl
Preprint SFB 00-16, März 2000

- [Mei00a] S. Meinel
CLIC - neue Perspektiven für die 3D - Strömungssimulation
Inbetriebnahme des Chemnitzer Linux - Clusters, TU Chemnitz, 11.10.2000.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Im Teilprojekt D3 ist ein leistungsfähiges Programmpaket für die Simulation zwei- und dreidimensionaler Strömungs- und Transportprobleme entstanden, das auf dem zur Zeit modernsten Parallelrechnersystemen der TU Chemnitz verfügbar ist. Es existiert ein erhebliches Potential an Erfahrungen mit komplexen strömungsmechanischen Problemstellungen in Zusammenhang mit der Simulation aus Hochleistungsrechnern.

In diesem Projekt mit breitem Anwendungshintergrund wurden theoretische Ergebnisse der zentralen Projektes A3 genutzt, validiert und weiterentwickelt. Die in der Strömungssimulation erkannten Notwendigkeiten gaben wichtige Hinweise für die Weiterentwicklungen auf dem Gebiet der Löserentwicklung.

Durch das Auslaufen der Projektförderung sind inhaltliche Ziele des im Berichtszeitraum 1999-2001 vorerst nicht erreicht worden. Dies betrifft vor allem den Ausbau der Simulationsprogramme für turbulente Strömungen, die Einbeziehung adaptiver Methoden und die in der Projektskizze [Mey99] ins Auge gefasste ALE-Option. Die vorliegenden Ergebnisse stellen jedoch einen fundierten Ausgangspunkt für die numerische Simulation von komplexen Strömungsvorgängen dar, die etwa in einem geeigneten Anwendungsprojekt integriert sein könnten.