

Adaptive Relaxation zur Stabilisierung und Beschleunigung partitionierter Multiphysiksimulationen

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau und
Verfahrenstechnik der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades
eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften
Dr.-Ing.

genehmigte Dissertation

von

Daniel Jung
aus
Hof/Saale

Referent: Prof. Dr.-Ing. P. Köhler
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. H.-B. Woyand
Tag der mündlichen Prüfung: 12. April 2013

Kurzfassung

Grundlegende Implementierungsansätze partitionierter Multiphysiksimulationen erfordern zumeist aufwändige, iterative Berechnungen, um die Aussagekraft der Analysen zu gewährleisten. In vielen Anwendungsbereichen lassen sich diese Analysen daher nicht rentabel durchführen. In der vorliegenden Arbeit wird ein Prinzip zur adaptiven Relaxation aufbauend auf der klassischen Schwingungslehre entwickelt, um den genannten Aufwand signifikant zu reduzieren. Es werden keine Informationen über die Eigenschaften der Gleichungssysteme benötigt, wodurch das Verfahren auch in der Kopplung von Black-Box-Programmen eingesetzt werden kann, die keine speziellen Schnittstellen außer der Ein- und Ausgabe von Rand- und Ergebniswerten im ASCII-Format bieten. Es ist nicht auf Benutzereinstellungen angewiesen, da es selbstständig problemadaptive Relaxationsparameter bestimmt. In den durchgeführten Untersuchungen zeigten sich analog zu der Auslegung des Relaxationsprinzips keine Einschränkungen auf spezielle Problemstellungen. Durch die geringe Anzahl an durchzuführenden Berechnungsoperationen wird die behandelbare Modellgröße nicht beschränkt.

Aufbauend auf dem erarbeiteten Prinzip werden drei unterschiedliche Algorithmen entwickelt. Durch die Durchführung und Auswertung umfassender Parameterstudien an Testmodellen erfolgt deren Kalibrierung und Bewertung. Die Effizienz des Verfahrens wird anhand von praxisrelevanten, gekoppelten Problemstellungen im Bereich der Fluid-Struktur-Interaktion sowie einer Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse an Modellen eines Wärmetauschers sowie des Abgastraktes eines turboaufgeladenen Verbrennungsmotors verifiziert. Der Berechnungsverlauf zwischen unstabiler und stabiler Berechnung wird vergleichend gegenüber gestellt. Die Ergebnisse, in denen die erforderlichen Kopplungsiterationen um 50 bis 60% im Vergleich zur unstabiler gekoppelten Berechnung gesenkt werden konnten, belegen den erreichbaren Effizienzgewinn. Im praktischen Einsatz lässt sich somit der Aufwand von Multiphysikanalysen deutlich reduzieren. Durch die signifikante Senkung des notwendigen Zeit- und Kostenaufwandes lassen sich diese deutlich wirtschaftlicher durchführen. Auch die Ausweitung der gekoppelten Simulation in Anwendungsbereiche, in denen diese aufgrund der Rentabilität bisher nicht durchgeführt wurden, wird damit möglich.

Abstract

Implementations of partitioned multiphysics simulations require in general expensive, iterative simulations to be able to provide dependable results. This causes this simulation method to be too expensive in many cases. The work carried out in this thesis proposes a method that is based on the classical theory of oscillations to reduce the arising effort significantly by adaptive relaxation. The method doesn't require any information about the involved equations what even allows for application in coupled simulations between black-box-programs which have no special interfaces except reading and writing boundary-conditions in any ASCII format. It does not have the need for user settings as it automatically calculates problem specific relaxation factors. The conducted simulations meet the target of the method's design as they didn't show any limitations on specific types of problems. Furthermore there is no limitation of maximum model sizes as only few calculations have to be carried out for the adaptive relaxation. Three different algorithms are created based on the developed principle. Extensive parameter studies are employed for the calibration and evaluation of the three algorithms. Verification simulations of the vibration behavior of a exhaust tract with build-in turbochargers as well as a thermal fluid-structure interaction in the simulation of a counter flow heat exchanger demonstrate the efficiency of the developed method. The comparison of the simulations with and without use of the developed algorithm reveals a decrease of the numerical cost by 50 to 60%.

The developed method reduces the additional effort needed for coupled simulations compared to single physics simulations significantly. Therefore partitioned multiphysics simulation can be extended to fields of application where such analyses have been too expensive before.

”Wer glaubt, etwas zu sein,
hat aufgehört, etwas zu werden.”

Sokrates

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand als externe Dissertation an der Universität Duisburg-Essen am Institut für Produkt Engineering in Zusammenarbeit mit der Firma P+Z Engineering GmbH in München.

Das Zusammenspiel aus universitärem und industriellem Umfeld hat die erreichten Ergebnisse durch Ansätze aus Praxis und Theorie aus vielfältigen ingenieurwissenschaftlichen Bereichen maßgeblich beeinflusst und ermöglicht.

Für die Betreuung dieser Arbeit möchte ich Herrn Prof. Dr. Peter Köhler seitens der Universität Duisburg-Essen sowie Herrn Dr. Jan Reger seitens P+Z Engineering GmbH von ganzem Herzen danken. Ihre Offenheit für neue Ideen und Sichtweisen auf die sich eröffnenden Problemstellungen, Ihre kompetente Unterstützung in allen auftretenden Fragen, die zahlreichen fachlichen Diskussionen, und die Ermöglichung einer völlig freien Gestaltung der Arbeit hat entscheidend zu ihrem Gelingen beigetragen. Ich hätte mir keine bessere Betreuung wünschen können.

Während der Erstellung dieser Arbeit sind Fragestellungen aufgetreten, die sich weit in die Mathematik und die Informatik hinein erstrecken. Für alle Diskussionen, das gemeinsame Brainstorming und die folgenden Beratungen über Themen von Arbitrary Lagrangian Eulerian Methoden über die Programmierung in C++, Perl, Python, VBA[®], VBS[®], Matlab[®] und Shellskripte, Berechnungen im Bereich der strukturellen, thermischen, elektrischen, optischen und elektromagnetischen Simulation, objektorientierte Programmierung, Optimierungsverfahren, Software- und Betriebssysteminfrastrukturen unter Linux und Windows bis hin zu verteiltem Rechnen möchte ich Herrn Dr. Jan Reger, Herrn Dr. Gunnar Teichelmann und Frau Dr. Sylvia Breun herzlich danken.

Die entwickelten adaptiven Relaxationsalgorithmen mussten während der Arbeit für ein möglichst weites Feld an Problemstellungen entwickelt und getestet werden. Für die durchgeführten CFD Berechnungen reichte das Aufgabenspektrum von der Theorie, über

die Erweiterung und Modifikation von Quellcode des verwendeten Feldberechnungsprogramms OpenFOAM® bis hin zur Modelldefinition und praktischen Durchführung von CFD-Berechnungen. Herzlich danken möchte ich Herrn Dr. Daniel Köster, der mir stets in allen Fragen rund um dieses Themengebiet hilfreich und kompetent zur Seite stand. Bedanken möchte ich mich bei allen meinen Kollegen aus der Abteilung *Simulation Antrieb und Fahrwerk* sowie der Firma P+Z Engineering im Gesamten. Mit ihrer Unterstützung und dem mehr als nur angenehmen Arbeitsklima haben sie einen beträchtlichen Teil zum Gelingen der vorliegenden Arbeit beigetragen.

Meinen Kollegen am Lehrstuhl für *Rechnereinsatz in der Konstruktion* am *Institut für Produkt Engineering* möchte ich ebenfalls recht herzlich danken. Trotz meiner zeitweise langen Abwesenheit durch das Arbeiten vor Ort bei P+Z Engineering in München, durfte ich mich stets als Teil des Teams fühlen.

Nicht zuletzt möchte ich meiner Familie und meinen Freunden für Ihre Unterstützung während dieser Arbeit danken. Zwischen vielen Höhen und Tiefen, nicht nur während dieser Zeit, waren sie mir immer eine große Hilfe.

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen	x
Abkürzungen	xii
1 Einleitung	1
2 Konzepte partitionierter Multiphysiksimulations- und bekannter Stabilisierungsmethoden	5
2.1 Partitionierte Multiphysiksimulation	5
2.1.1 Abgrenzung zu alternativen Verfahren	5
2.1.2 Softwarekonzepte zur Multiphysiksimulation	11
2.1.3 Kopplungsschemata in partitionierten Multiphysiksimulationen . .	13
2.1.4 Zeitintegrationsverfahren in transienten partitionierten Berechnungen	17
2.1.5 Ansteuerung der Solver und Datenübergabemethoden in programmexternen Multiphysiksimulationen	20
2.1.6 Aktuell in der Praxis eingesetzte Verfahren	23
2.2 Stabilisierungsverfahren	24
2.2.1 Notwendigkeit von Stabilisierungsalgorithmen	24
2.2.2 Grenzen von Stabilisierungsverfahren	27
2.2.3 Arbeitsweise von Stabilisierungsverfahren	28
2.2.4 Bekannte Verfahren	28
2.3 Zusammenfassung	37
3 Charakterisierung gekoppelter Berechnungsprozesse	39
3.1 Verfügbare Informationen	39
3.2 Ableitbare Informationen	40
3.2.1 Ergebnisverlauf	40

3.2.2	Verlauf des lokalen Fehlers	42
3.2.3	Abschätzung der Kondition	43
4	Stabilisierung und Beschleunigung eng gekoppelter Prozesse	46
4.1	Auswahl eines Verfahrens als Grundlage der adaptiven Stabilisierung . .	46
4.2	Herleitung des adaptiven Relaxationsverfahrens	47
4.2.1	Transfer von Erkenntnissen der klassischen Schwingungslehre auf gekoppelte Berechnungsprozesse	47
4.2.2	Prinzip zur adaptiven Relaxationsparameterbestimmung	49
4.3	Adaptive Stabilisierungsalgorithmen	55
4.3.1	Erarbeitung geeigneter Ansatzfunktionen	55
4.3.2	Linearer Algorithmus	59
4.3.3	Nichtlinearer Algorithmus	61
4.3.4	Gemischt linearer-nichtlinearer Algorithmus	62
5	Kalibrierung der adaptiven Stabilisierungsalgorithmen	64
5.1	Parameterstudien zur Kalibrierung	64
5.2	Modelle	66
5.2.1	Wärmeleitungs- und Wärmestrahlungsberechnung	66
5.2.2	Fluid-Struktur Interaktionsberechnung	70
5.3	Berechnungen	73
5.3.1	Varierte Parameter und Schrittweiten	73
5.3.2	Methode der Ergebnisanalyse	74
5.4	Auswahl von Algorithmus und Parameter	78
5.4.1	Bewertungskriterien	78
5.4.2	Ergebnisse	79
6	Verifikation der Algorithmen	82
6.1	Thermische Fluid-Struktur Interaktion	82
6.1.1	Problemstellung	82
6.1.2	Ergebnisse	84
6.2	Gekoppelte Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse	90
6.2.1	Problemstellung	90
6.2.2	Ergebnisse	93
6.3	Bewertung der Ergebnisse	97

7 Schlussfolgerungen und Zusammenfassung	99
Literaturverzeichnis	101
Abbildungsverzeichnis	105
Tabellenverzeichnis	108
Appendix	109
Anhang	110

Formelzeichen

Größe	Bedeutung
A	Fläche
c	Federsteifigkeit
c_w	Luftwiderstandsbeiwert
Δ	Veränderung / Verschiebung
$\Delta\omega_i$	Veränderung des Relaxationsparameters in der Iteration i
e	Fehlerfunktional
e_{lokal}	lokaler Fehler
$e_{\text{Konvergenz}}$	Fehlerschrankenwert
ε	Strahlungskoeffizient
F_x	Randwert / Lastvektor der Problemstellung x
$F_x(u_y)$	Randwert / Lastvektor der Problemstellung x abhängig des Ergebnisses der Problemstellung y
Γ_u	Unterer Rand des zulässigen Bereichs für ω
Γ_o	Oberer Rand des zulässigen Bereichs für ω
$h(P_j)$	Schrittweite des Parameters P_j
i	Zähler der Iteration
$i_{\text{Konvergenz}}$	Benötigte Iterationen bis zum Erreichen von Konvergenz
$i_{\omega \text{ Konvergenz}}$	Benötigte Iterationen bis zum Erreichen von Konvergenz unter Einsatz des linearen adaptiven Stabilisierungsalgorithmus
j	Element- / Knotenindex
K	Konvergenzcharakterisierungsfaktor
κ	K -abhängiger Skalierungsfaktor für die adaptive Relaxation
κ_{slope}	Anstiegsskalierungsfaktor für κ

Formelzeichen

K_{xx}	Koeffizientenmatrix der Problemstellung x
λ	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
Λ	Operator der die Anzahl der Einträge einer Matrix zurück gibt
μ	Künstliche Masse des Stabilisierungsalgorithmus
η	Relative Beschleunigung einer gekoppelten Berechnung
$\eta(k)$	Relative Beschleunigung einer gekoppelten Berechnung mit der Parametrisierung k des untersuchten Algorithmus
η_i	Relative Beschleunigung einer gekoppelten Berechnung für das Modell i
η_{global}	Globale relative Beschleunigung über mehrere unterschiedliche Berechnungsmodelle
ω	Relaxationsparameter
ω_{opt}	Optimaler Relaxationsparameter
Ω	Stabilisierungsfunktion
Ω^ω	Von ω abhängiger Anteil der Stabilisierungsfunktion
Ω^K	Von K abhängiger Anteil der Stabilisierungsfunktion
P_J	Parameter J der Parameterstudie
p	Druck
Φ	Adaptionseinflussfaktor des Relaxationsalgorithmus
\dot{q}	Spezifischer Wärmestrom
ρ	Dichte
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante ($5,67 \cdot 10^{-8}$)
$t_{Gleichungssystem\ x}$	Zeitbedarf zur Lösung des Gleichungssystems x
t_n	Zeitpunkt n
T	Temperatur
t	Zeit
v_x	Geschwindigkeit in Richtung der x-Koordinate
x_i	Knoten- / Elementspezifisches Ergebnis der Iteration i
Ξ_u	Asymmetrieeinflussfaktor für $\omega_{i-1} < 1$
Ξ_o	Asymmetrieeinflussfaktor für $\omega_{i-1} > 1$

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
ASCII	American Standard Code for Information Interchange
API	Application Programming Interface
CAD	Computer Aided Design
CAE	Computer Aided Engineering
CFD	Computational Fluid Dynamics
CSV	Comma Separated Values
FE	Finite Elemente
FEM	Finite Elemente Methode
FSI	Fluid-Struktur Interaktion
FVM	Finite Volumen Methode
RMS	Root Mean Square
ROM	Reduced Order Model

1 Einleitung

Im globalisierten Wettbewerb werden an die technische Entwicklung stetig steigende Anforderungen gestellt. Verkürzte Produktentwicklungszyklen für zunehmend komplexere Produkte machen den Einsatz von technischen Berechnungen in allen Phasen der Entwicklung notwendig. Diese muss den Anforderungen hinsichtlich ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkten durch Erhöhung von Effizienz, Ausfallsicherheit, Einsparung von Material und Ausreizung dessen Eigenschaften gerecht werden. Für die dabei relevanten physikalischen Problemstellungen wie z.B. Strukturmechanik oder Strömungsdynamik steht ein weites Feld an spezialisierten Berechnungsprogrammen zur Verfügung. Die jeweilige Problemstellung wird im Regelfall auf den für sie zentralen physikalischen Bereich reduziert und mithilfe eines der vorhandenen Programme behandelt.

In zunehmendem Maß führt die weiterhin stattfindende Steigerung der Anforderungen an die Güte der Berechnungsergebnisse zur Notwendigkeit, die isolierte Berechnung einzelner Bereiche aufzugeben und die Wechselwirkungen zwischen mehreren physikalischen Effekten in Multiphysikanalysen zu berücksichtigen, um ausreichende Belastbarkeit und Aussagekraft der Ergebnisse zu gewährleisten. Hierfür existieren zwei prinzipielle Ansätze. Zum Einen können Gleichungen aufgestellt werden, die alle Effekte monolithisch berücksichtigen. Zum Anderen können im sogenannten partitionierten Ansatz die Gleichungen für einzelne physikalische Effekte miteinander gekoppelt gelöst oder die entsprechenden Berechnungsprogramme gekoppelt miteinander betrieben werden. Die partitionierte Herangehensweise bietet, ohne die Notwendigkeit Anpassungen an vorhandenen Programmen vorzunehmen, die Möglichkeit alle physikalischen Effekte, die durch spezialisierte Programme abgedeckt werden, interagierend zu berechnen. Eine aufgrund ihrer einfachen Implementierbarkeit verbreitete Ausprägung ist die Kopplung mithilfe von Fixpunktiterationsverfahren. Bei diesen Verfahren werden die Ergebniswerte für die zu koppelnden Freiheitsgrade direkt zwischen den Berechnungsprogrammen ausgetauscht. Es können nahezu alle verfügbaren CAE-Programme eingebunden werden,

da lediglich Randwerte der Berechnungen vorgegeben und Ergebnisse ausgegeben werden müssen. Um belastbare, den monolithischen Ansätzen äquivalente, Ergebnisse zu erzeugen werden die Programme eng gekoppelt. Die entstehenden gekoppelten Berechnungen weisen teilweise schlechte Konvergenzeigenschaften auf, was zu hoher Belastung von Soft- und Hardwareressourcen führt. Hierdurch wird die Wirtschaftlichkeit und Einsetzbarkeit dieser Berechnungsart herabgesetzt solange die erreichte Ergebnislage nicht reduziert werden soll.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung einer generell einsetzbaren Methode zur Stabilisierung und Beschleunigung eng gekoppelter Berechnungen, um die benötigten Soft- und Hardwareressourcen in partitionierten Multiphysikanalysen zu verringern. Die Anforderungen an die gekoppelt betriebenen Programme sollen, um den generellen Einsatz der entwickelten Methode zu ermöglichen, nicht über die ohnehin zur partitionierten Multiphysiksimulation notwendigen Anforderungen hinausgehen. Ebenfalls soll die Methodik in den Standardansätzen zur gekoppelten Simulation, den eng gekoppelten Fixpunktiterationsverfahren, einsetzbar sein.

Bekanntere Verfahren zur Reduzierung der zur partitionierten Multiphysiksimulation benötigten Soft- und Hardwareressourcen lassen sich unter dem Begriff der Stabilisierungs- bzw. Beschleunigungsverfahren zusammenfassen. Bestehende Ansätze, wie die in [26] oder [52] vorgestellten, zielen auf eine möglichst effiziente Lösung spezieller gekoppelter Problemstellungen ab, erfordern Anpassungen an den eingebundenen Programmen ([21]), der Berechnungsmodelle ([44]) oder sind in der behandelbaren Modellgröße beschränkt ([52], [53]). Die generelle Einsetzbarkeit der Verfahren ist somit nicht gegeben. Grundlegende, statische Implementierungen von Relaxationsverfahren, wie diese in bestehenden Programmpaketen zum Teil enthalten sind, erfordern die der Berechnung vorgelagerte Festlegung von Relaxationsfaktoren. Die Abschätzung der Relaxationsfaktoren muss problemstellungsabhängig durch den Anwender vorgenommen werden und ist somit fehleranfällig, sodass ein optimaler Stabilisierungseffekt nur im Sonderfall erreicht werden kann. Die notwendige kopplungsgrößenspezifische, wie z.B. knoten- oder elementspezifische, Einstellung der Faktoren sowie deren Veränderung während des Verlaufs einer gekoppelten Berechnung ist nicht möglich. Verfahren aus der numerischen Mathematik, die die Relaxationsfaktoren adaptiv bestimmen (z.B. in [58]) benötigen Kennwerte der Gleichungssysteme, wie z.B. dessen Eigenwerte, die im Regelfall nicht in partitionierten Multiphysikanalysen zur Verfügung stehen. Weiterhin reduziert deren Berechnung den erreichbaren Effizienzvorteil. Diese Eigenschaften bestehender Verfahren

verhindern dementsprechend deren generelle Einsetzbarkeit bei größtmöglicher Effizienz unter den gegebenen Randbedingungen.

Um ohne Voreinstellungen generell einsetzbar zu sein, benötigt die entwickelte Methode Informationen über die Eigenschaften einer zu stabilisierenden Berechnung. Die Bereitstellung der Informationen darf lediglich durch Analyse der ohnehin verfügbaren Daten aus den übergebenen Daten zwischen den gekoppelten Programmen geschehen. Die Anforderungen an die gekoppelten Programme, für die Kopplung benötigte Daten einlesen und ausgeben zu können, wird somit nicht gesteigert und der benötigte Aufwand für die Durchführung von Stabilisierungsoperationen durch die entwickelte Methode gering gehalten. Auf Basis genereller Eigenschaften von gekoppelten Berechnungen sowie den automatisch bereitgestellten Informationen muss ein Prinzip entwickelt werden, das die adaptive Bestimmung optimaler Relaxationsparameter ermöglicht. Durch die Umsetzung des Prinzips in konkrete Algorithmen und deren Implementierung in einem in dieser Arbeit aufzubauenden Kopplungsprogramm, kann dessen Eignung zur Stabilisierung und Beschleunigung partitionierter Multiphysikanalysen in Verifikationsberechnungen untersucht werden.

Zunächst werden in Kapitel 2 unterschiedliche Konzepte von Multiphysiks simulationsverfahren und bekannte Stabilisierungsverfahren, deren Anwendungsgebiete und Eigenschaften vorgestellt.

In Kapitel 3 werden grundlegende Eigenschaften der übergebenen Daten zwischen den Berechnungsprogrammen bzw. Gleichungssystemen vorgestellt. Darauf aufbauend wird eine Methode zur Charakterisierung gekoppelter Berechnungen entwickelt, die die benötigten Informationen zur adaptiven Stabilisierung gekoppelter Berechnungen bereitstellt.

In Kapitel 4 wird eine neue Methode zur adaptiven Stabilisierung partitionierter Berechnungen aus der klassischen Schwingungslehre hergeleitet. Konkrete Implementierungen der neu entwickelten Stabilisierungsmethode werden aus ausgewählten, entwickelten Ansatzfunktionen und aus Ihnen abgeleiteten Algorithmen aufgebaut.

Kapitel 5 stellt die Kalibrierung der in Kapitel 4 entwickelten Algorithmen vor. Die für die Kalibrierung entwickelten Modelle, die eingesetzten Parameterstudien, sowie die entwickelte Methodik zum Auffinden stabiler, globaler Optima beliebig hochdimensionaler Parameterstudien werden beschrieben. Es werden Kriterien für die Bewertung der Parametersätze definiert. Für anschließende Verifikationsberechnungen wird der als optimal identifizierte Algorithmus mit entsprechender Kalibrierung ausgewählt.

In Kapitel 6 wird anhand von praxisnahen Problemstellungen die Effektivität und Effizienz des erarbeiteten Stabilisierungsverfahrens verifiziert. Auswirkungen auf den Verlauf der gekoppelten Berechnung werden herausgearbeitet.

In der vorliegenden Arbeit wird dabei die Nomenklatur der Finiten-Elemente-Methode verwendet. Die getroffenen Aussagen sind, solange dies nicht gesondert erwähnt wird, auch für andere Berechnungsverfahren gültig bzw. auf diese übertragbar.

Die durchgeführten Untersuchungen und erlangten Ergebnisse der vorliegenden Arbeit lassen sich von der Multiphysiksimulation ebenso auf gekoppelte Berechnungen von Modellen unterschiedlicher Größenordnung, den sogenannten Multi-Scale-Analysen, übertragen.

2 Konzepte partitionierter Multiphysiksimulations- und bekannter Stabilisierungsmethoden

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Methoden zur Multiphysiksimulation sowie deren Ausprägungen vorgestellt. Ziel ist es, die Eigenschaften der partitionierten Multiphysiksimulation unter Einbindung von Berechnungsprogrammen, deren interne Vorgänge für ein Kopplungsprogramm nicht bekannt sind (Black-Box-Programme), aufzuzeigen und gegenüber anderen Verfahren abzugrenzen. Hierdurch werden die Randbedingungen für das in den weiteren Kapiteln entwickelte adaptive Stabilisierungsverfahren herausgearbeitet. Weiterhin werden bekannte Stabilisierungsverfahren für eng gekoppelte, partitionierte Multiphysiksimulationen vorgestellt. Mögliche Einsatzgebiete und Eigenschaften werden herausgearbeitet.

Die einzelnen Abschnitte dieses Kapitels beschäftigen sich mit unterschiedlichen, nicht aufeinander aufbauenden, sondern gleichzeitig vorhanden sein könnenden Aspekten des betrachteten Themengebiets. Die genannten Eigenschaften überlagern sich bei Aufbau eines Multiphysiksimulationsverfahrens je nach Auswahl der in den entsprechenden Abschnitten aufgezeigten Optionen.

2.1 Partitionierte Multiphysiksimulation

2.1.1 Abgrenzung zu alternativen Verfahren

Die Verfahren zur Multiphysiksimulation teilen sich hinsichtlich der grundlegenden mathematischen Modellierung der Problemstellungen in partitionierte, monolithische und hybride Ansätze auf. Dieser Abschnitt grenzt das in dieser Arbeit untersuchte partitio-

nierte gegenüber dem monolithischen und hybriden Verfahren ab. Die in diesem Abschnitt gewählten Darstellungsweisen orientieren sich aus Gründen der Übersichtlichkeit an statischen oder quasi-statischen Problemstellungen. Die herausgestellten Eigenschaften gelten analog ebenfalls für dynamische Problemstellungen. Die Ansätze sind sowohl in den am Markt verfügbaren CAE-Programmen vorhanden, stehen aber auch weiterhin im Fokus aktueller Forschungsarbeiten (z.B. [5], [24], [26], [29], [37]).

Monolithische Multiphysiksimulationsverfahren

In monolithischen Verfahren wird ein Gleichungssystem aufgestellt, innerhalb dessen die gesamte gekoppelte Problemstellung modelliert ist. Für den Fall von zwei zu modellierenden, interagierenden physikalischen Feldern x und y kann das Gleichungssystem einer statischen Problemstellung in symbolischer Schreibweise als

$$\begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

dargestellt werden.

Hierbei stehen K_{xx} sowie K_{yy} für die Koeffizientenmatrizen der einzelnen Problemstellungen. K_{xy} und K_{yx} stehen für die Koeffizientenmatrizen, die die Interaktionen zwischen den Feldern beschreiben. u_x und u_y stehen für die unbekanntenen Vektoren die durch die Berechnung bestimmt werden. F_x und F_y stehen für die Lastvektoren, die Randbedingungen und äußere Kräfte beinhalten.

Die Gleichungen für die jeweiligen relevanten physikalischen Felder sind miteinander kombiniert. Die gemeinsame Auflösung der Gleichungen bewirkt, dass diese während der Berechnung miteinander im Gleichgewicht stehen. Hierdurch weisen monolithische Verfahren in vielen Fällen bessere Konvergenzeigenschaften hinsichtlich der Gleichgewichtsbestimmung zwischen den Feldern als partitionierte Verfahren auf. Existieren starke Wechselwirkungen zwischen den Feldern in einer gekoppelten Berechnung, beeinflussen sich die Lösungen also sehr stark gegenseitig, ist eine Lösung teilweise nur mit monolithischen Verfahren zu erreichen. Problemstellungen dieser Art treten z.B. in Fluid-Struktur-Interaktions-Aufgabenstellungen mit einem hohen Verhältnis der Fluidichte

zu Strukturdichte oder -festigkeit (vgl. [5]), wie z.B. Airbagentfaltungen, Fallschirmberechnung oder die Simulation einer wehenden Fahne im Wind, auf. Das Ergebnis der Fluidberechnung hat darin großen Einfluss auf das der Struktursimulation.

Die monolithische Formulierung der Gleichungen erzwingt eine einheitliche, gemeinsame Diskretisierung für die Einzelproblemstellungen. Diese gemeinsame Diskretisierung führt gegebenenfalls zu einer deutlichen Erhöhung der Freiheitsgrade und damit zu erhöhtem Zeitbedarf der Berechnung. Dies ist z.B. der Fall, wenn die Gleichungen in der isolierten Berechnung durch unterschiedliche Verfahren diskretisiert werden, wie z.B. Fluidberechnungen mithilfe der Finite-Volumen-Methode (FVM) und Strukturberechnungen mithilfe der Finite-Elemente-Methode (FEM).

Weiterhin liegen zum Teil unterschiedliche Größendimensionen in den gekoppelt zu berechnenden Feldern vor ([1], [6], [10], [57]). Diese Berechnungen werden als Multi-Scale Simulationen bezeichnet. Es treten dabei zur Multiphysiksimulation vergleichbare Effekte auf. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn in der Berechnung eines Akkumulators die wechselseitigen Effekte zwischen thermischen Zustand der Gesamtstruktur und der chemischen Effekte innerhalb der Akkumulatorzellen untersucht werden sollen ([56]). Die chemischen Effekte verlaufen lokal begrenzt und erfordern eine feine Diskretisierung. Die Gesamtstruktur des Akkumulators erfordert diese feine Diskretisierung nicht. Weiterhin stellt die Lösung der chemischen Differentialgleichungen in den chemisch inaktiven Bereichen des Akkumulators, wie dessen Gehäuse, zusätzlichen Aufwand dar.

Der Gleichungslösungsaufwand steigt im Allgemeinen bei monolithischer Formulierung überproportional im Vergleich zur Summe der Einzelfeldberechnungen an. Bereits bei Problemstellungen mit, aus praktischer Sicht, geringer Anzahl von Freiheitsgraden führt dies zur nicht mehr wirtschaftlichen Berechenbarkeit der betreffenden Problemstellung. Der gestiegene Ressourcen- und Zeitbedarf resultiert dabei aus den folgenden Faktoren:

- Die Struktur des Gleichungssystems verändert sich aufgrund der monolithischen Gleichungsformulierung. Spezielle Lösungsverfahren verlieren ihren Geschwindigkeitsvorteil oder weisen divergentes Verhalten auf.
- Spezielle Speicherungsverfahren, wie z.B. für dünn besetzte Matrizen, sind nicht mehr einsetzbar. Der Speicherbedarf übersteigt bereits bei einer relativ geringen Anzahl an Freiheitsgraden die verfügbaren Ressourcen im Hauptspeicher.

- Die Größe des Gleichungssystems steigt quadratisch mit der Anzahl der Freiheitsgrade. Der monolithische Gleichungsaufbau führt dementsprechend zu deutlich größeren Gleichungssystemen als die Summe der Einzelgleichungssysteme.

Um den gestiegenen Aufwand zu reduzieren, werden teilweise vereinfachte Ansätze für die einzelnen physikalischen Phänomene verwendet (vgl. [2]), wodurch die in realen Anwendungen notwendige Darstellung der Problemkomplexität häufig nicht in ausreichendem Maß sichergestellt ist. Monolithische Multiphysiksimulation eignet sich dementsprechend vorwiegend für Problemstellungen, in denen

- partitionierte Verfahren aufgrund starker Feldinteraktionen unzufrieden stellende Konvergenzeigenschaften aufweisen
- die zu berechnenden Felder häufig in gleicher Kombination auftreten und bereits bei Programmerstellung durch den Softwarehersteller bekannt sind
- die Modellgrößen hinsichtlich der Freiheitsgrade des Systems klein sind oder die Modelle aufgrund geringer Genauigkeitsanforderungen entsprechend reduziert werden können
- die gekoppelt zu berechnenden physikalischen Felder auf ähnliche Gleichungssysteme führen.

Partitionierte Multiphysiksimulationsverfahren

Partitionierte Verfahren behandeln gekoppelte Problemstellungen aus unterschiedlichen physikalischen Feldern in mehreren Gleichungssystemen. Die Gleichungssysteme, die bei der Berechnung der einzelnen physikalischen Effekte aufgestellt werden,

$$K_{xx} \cdot u_x = F_x(u_y) \tag{2.2}$$

sowie

$$K_{yy} \cdot u_y = F_y(u_x), \tag{2.3}$$

werden getrennt gelöst. Die Kopplung der Gleichungen wird durch Übergabe der errechneten Ergebnisse u_x bzw. u_y eines Gleichungssystems als Randwerte bzw. Lastvektoren

an das andere Gleichungssystem erreicht. Die dort definierten Randwerte erweitern sich damit zu $F_y(u_x)$ bzw. $F_x(u_y)$. Während der Berechnung der Einzelfeldgleichungssysteme werden diese Randbedingungen konstant gehalten. Rückwirkungen veränderter Ergebnisse der gelösten Gleichung werden erst in der nächsten Kopplungsiteration berücksichtigt. Hieraus resultieren die in Abschnitt 2.1.1 beschriebenen schlechteren Konvergenzeigenschaften der partitionierten Verfahren bei hohen Feldinteraktionen in der Problemstellung. In Abbildung 2.1 ist die Auswirkung zunehmend starker Feldinteraktion, mit der sich die Kondition der Problemstellung verschlechtert, auf die benötigten Iterationen einer partitionierten Berechnung dargestellt. Gute Kondition zeigt sich in einer geringen Anzahl von notwendigen Gleichgewichtsiterationen, schlechte Kondition entsprechend in einer hohen Anzahl an Gleichgewichtsiterationen. Mit zunehmender Fluiddichte wirken sich Fluidkräfte zunehmend stärker auf die Lösung der gekoppelten Problemstellung aus ([5]). Fehler in den über die Iterationen exakter werdenden Näherungslösungen für die Belastung der Struktur durch das Fluid beeinflussen dementsprechend stärker die Gesamtlösung der Problemstellung. Die Anzahl der benötigten Gleichgewichtsiterationen bis zum Erreichen der Konvergenz steigt exponentiell mit der Dichte des eingeströmten Fluides an.

Die Kopplung der Einzelfeldgleichungen vermeidet die stark ausgeprägte, im vorangegangenen Abschnitt beschriebene, Erhöhung des Ressourcenbedarfs. Zusätzlich bleibt die Struktur der Gleichungssysteme erhalten. Spezialisierte Lösungs- und Speicher-algorithmen können weiterhin ohne Effizienzeinbußen verwendet werden.

Partitionierte Berechnungsverfahren eignen sich somit für Problemstellungen, in denen

- Interaktionen zwischen den zu berechnenden Feldern nicht zu stark ausgeprägt sind oder für eine konkrete Problemstellung geeignete Stabilisierungsalgorithmen verfügbar sind (siehe Abschnitt 2.2) um kopplungsbedingt divergentes Verhalten der gekoppelten Berechnung zu vermeiden
- die Anzahl der Freiheitsgrade über den Möglichkeiten einer monolithischen Kopplung liegen, wie dies in der Praxis häufig der Fall ist
- die Art der zu lösenden Gleichungen der zu koppelnden Felder voneinander abweicht und daher die Anwendung unterschiedlicher Algorithmen für die Lösung der einzelnen Felder vorteilhaft ist

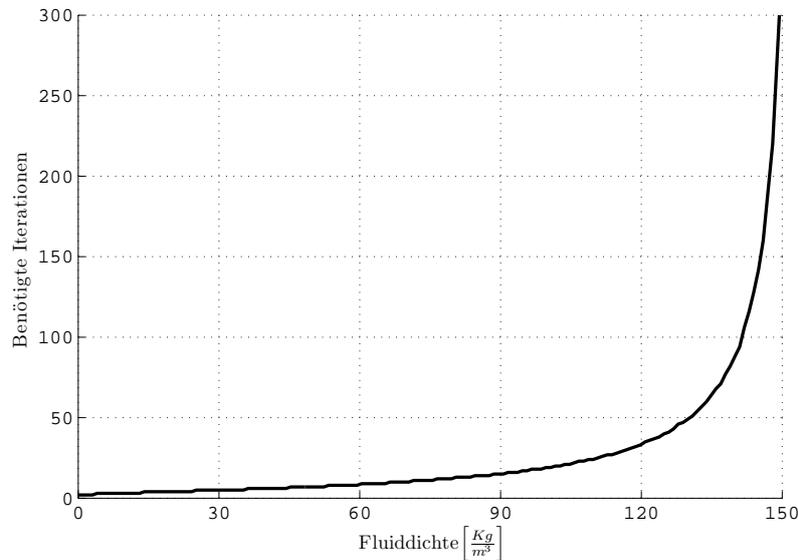


Abbildung 2.1: Benötigte Kopplungsiterationen in Abhängigkeit des Ausmaßes der Feldinteraktionen durch veränderte Fluiddichte in einer Fluid-Strukturinteraktionsberechnung anhand des Modells "FSI mit senkrechter Initialposition" aus Kapitel 5.

- die Geometrie innerhalb derer die unterschiedliche Effekte ablaufen unterschiedliche Größenordnungen aufweist und damit eine monolithische Formulierung der Problemstellung nicht effizient praktikabel ist

Hybride Multiphysiksimulationsverfahren

Hybride Multiphysiksimulationsverfahren vereinen monolithische und partitionierte Verfahren. Auf ähnliche Gleichungssysteme führende Problemstellungen, wie z.B. elektrische Simulationen und Wärmeleitungsberechnungen, werden in der hybriden Multiphysiksimulation monolithisch behandelt. Physikalische Felder, deren mathematische Modellierung auf abweichende Gleichungssystemstrukturen führt oder die entstehenden Matrizen zu stark vergrößern würde, werden nach dem partitionierten Schema angebunden. Dies ist z.B. der Fall, wenn zu der Berechnung einer elektrisch bedingten Aufheizung auch Wechselwirkungen mit einem umgebenden Fluid rechnerisch abgebildet werden müssen. In diesem Fall lässt sich die elektrisch-thermische Aufheizung einer Struktur monolithisch behandeln. Das entstehende Gleichungssystem wird nach dem partitionierten Schema

mit der Fluidberechnung gekoppelt.

2.1.2 Softwarekonzepte zur Multiphysiksimulation

Programminterne Multiphysiksimulation

Bei der programminternen Multiphysiksimulation existiert ein alleinstehendes Berechnungsprogramm. Dieses kann alle für eine oder mehrere spezielle Problemstellungen relevanten physikalischen Felder sowie deren Interaktionen mathematisch abbilden. Eigenschaften dieses Konzeptes sind:

- Der Benutzer bearbeitet die Problemstellung mit einem einzigen Programm, in das auch Pre- und Postprocessinganwendungen integriert sein können.
- Modellaufbau, Kopplungsvorgänge und die Auswertung der Berechnung können für den Benutzer vereinfacht dargestellt werden.
- Das Programm hat vollen Zugang zu den Gleichungslösungsalgorithmen und Kennwerten der einzelnen Berechnungen.
- Kriterien, wie z.B. die Konvergenzkriterien der ggf. partitioniert gelösten Gleichungssysteme (vgl. Abschnitt 2.1.1), können während der Berechnung geändert und somit flexibel an den Berechnungsablauf zur Steigerung der Effizienz angepasst werden.
- Bereits bei der Erstellung der Software müssen die zu behandelnden physikalischen Felder bekannt sein.
- Die Software kann bei der Programmierung auf die relevanten physikalischen Felder angepasst und optimiert werden.
- Die mathematische Modellierung der gekoppelten Problemstellung kann durch alle in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Methoden durchgeführt werden.

Programmexterne Multiphysiksimulation

Bei der programmexternen Multiphysiksimulation werden mehrere Berechnungsprogramme miteinander gekoppelt betrieben. Es existiert kein alleinstehendes Multiphysikberechnungsprogramm. Die Prozesskommunikation und -steuerung wird durch ein Kopplungsprogramm geregelt, das aus Softwareperspektive der Kategorie Middleware (u.A. [38], [4]) zuzuordnen ist. Ebenfalls kann das Kopplungsprogramm in einem der in der Kopplung eingebundenen Berechnungsprogramme implementiert sein. Die wesentlichen Eigenschaften des programmexternen Konzeptes sind:

- Fachbereiche oder Spezialisten für spezielle Einzelfeldproblemstellungen können weiterhin mit bestehenden Programmen und Prozessen arbeiten. Der Vorgang wird lediglich erweitert, nicht geändert.
- Das Kopplungsprogramm führt keine direkten Berechnungsschritte für Ergebnisse der physikalischen Problemfelder aus und ist daher durch Anbindung entsprechender Programme prinzipiell universell einsetzbar.
- Ganzheitliches Pre- und Postprocessing für alle physikalischen Felder ist im Regelfall aufgrund stark unterschiedlicher Strukturen angebundener Programme nur bedingt realisierbar.
- Die mathematische Modellierung der gekoppelten Problemstellung ist prinzipbedingt auf die in Abschnitt 2.1.1 vorgestellten Methoden der partitionierten bzw. hybriden Multiphysiksimulation beschränkt.
- Die relevanten Feldinteraktionen müssen im Allgemeinen vor jeder gekoppelten Berechnung definiert werden.

2.1.3 Kopplungsschemata in partitionierten Multiphysiksimulationen

Mathematische Interpretation als aufgespaltenes monolithisches Verfahren

Der partitionierte Ansatz zur Berechnung von Multiphysikproblemstellungen lässt sich als aufgespaltenes monolithisches Verfahren interpretieren (vgl. Abschnitt 2.1.1). Hierfür wird als gedankliche Ausgangsbasis angenommen, dass das Gleichungssystem 2.1 auf Seite 6 bekannt ist. Dessen Lösung kann dann durch ein Gleichungslösungsverfahren, wie z.B. Jacobi- oder Gauß-Seidel, berechnet werden. Durch den Einsatz der Block-Versionen dieser Gleichungslösungsverfahren kann das Gleichungssystem in einzelne Untermatrizen zerlegt werden, die miteinander gekoppelt gelöst werden können.

Durch dieses Verfahren kann die Gesamtkoeffizientenmatrix des gekoppelten Problems durch geeignete Partitionierung auf die Gleichungssysteme der physikalischen Einzelproblemstellungen x und y aufgeteilt werden (Gleichung 2.2 und 2.3). Diese Gleichungssysteme stehen in Form von Black-Box-Berechnungsprogrammen für ein weites Feld an physikalischen Problemstellungen zur Verfügung. Die nicht bekannten Kopplungsmatrizen K_{xy} und K_{yx} des Gesamtgleichungssystems werden durch die Aufteilung nicht benötigt. Die Kopplung der Phänomene wird über Datenübergaben zwischen den Gleichungssystemen erreicht. Das zugrunde gelegte Kopplungsschema auf Ebene des Kopplungsprogramms entscheidet über die Ablaufsteuerung der Kopplung und hat entscheidenden Einfluss auf Stabilität und Konvergenzordnung der gekoppelten Berechnung.

In diesem Abschnitt werden die häufig in der partitionierten Multiphysiksimulation verwendeten Fixpunktiterationsverfahren Jacobi- und Gauß-Seidel Verfahren vorgestellt. Die in diesem Abschnitt herausgearbeiteten Eigenschaften hinsichtlich des Ablaufs der Berechnung beziehen sich auf die Unterscheidung zwischen paralleler und sequentieller Abarbeitung der eingebundenen Berechnungsprogramme. Dies betrifft sowohl die Abarbeitung der Zeitschritte in transienten Berechnungen, als auch die Gleichgewichtsituationen in eng gekoppelten Berechnungen (vgl. Abschnitt 2.1.4). Quasi-Newton-Verfahren werden in Abschnitt 2.2 vorgestellt, da diese als um eine Stabilisierung erweiterte Version der Fixpunktiterationsverfahren interpretiert werden können. Informationen zu den grundlegenden numerischen Verfahren, von denen die vorgestellten Kopplungsschemen abgeleitet sind, finden sich in der entsprechenden Fachliteratur (z.B. [11]).

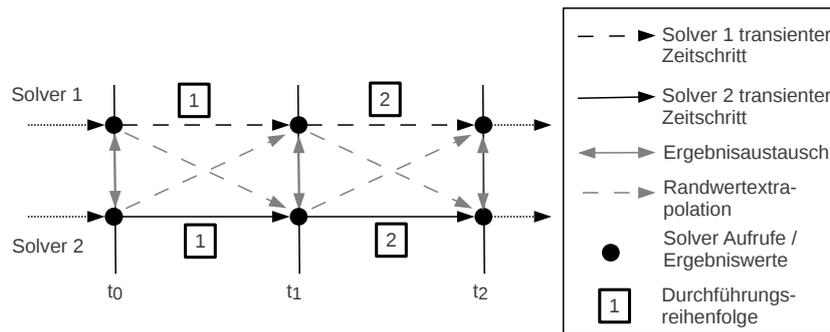


Abbildung 2.2: Schema einer nach dem Jacobi Verfahren durchgeführten gekoppelten Simulation.

Jacobi Verfahren

Das Jacobi- oder Gesamtschrittverfahren ist ein iteratives Berechnungsverfahren für lineare Gleichungssysteme. Dabei wird jede Gleichung des Gleichungssystems nach jeweils einem der zu berechnenden Freiheitsgrade aufgelöst, und dessen aktuelle Näherungslösung mit den in der vorhergehenden Iteration berechneten Näherungswerten der restlichen Freiheitsgrade berechnet. Da die Lösung jeder Gleichung ausschließlich von bereits in der vorangegangenen Iteration errechneten Näherungslösungen abhängt, ist das Verfahren vollständig parallelisierbar. In Abbildung 2.2 ist der Ablauf einer nach dem Jacobi-Verfahren durchgeführten gekoppelten transienten Berechnung dargestellt. Zwei gekoppelt betriebene Berechnungsprogramme oder Gleichungssysteme werden gleichzeitig aufgerufen. Ebenfalls parallel wird eine Ergebnisextrapolation für den folgenden Zeitschritt durchgeführt. Die Iteration des Verfahrens ist in dem gezeigten Beispiel die Iteration über die zu berechnenden Zeitschritte der Simulation. Der Verfahrensablauf bei iterativer Berechnung von statischen Analysen weist vergleichbare Eigenschaften auf. In der partitionierten Multiphysiksimulation können in einem Jacobi-Schema entsprechend die Gleichungssysteme aller physikalischen Felder parallel gelöst werden. Dem zeitlichen Vorteil der parallelen Abarbeitung steht die im Verhältnis zu anderen Methoden niedrige Konvergenzordnung des Verfahrens entgegen ([11]). Es müssen dementsprechend mehr Iterationen bis zum Erreichen des Gleichgewichts durchgeführt werden, sofern die Berechnung nach dem eng gekoppelten Schema (vgl. Abschnitt 2.1.4) durchgeführt wird. In schwach gekoppelten, transienten Berechnungen sinkt die Ergebnisgüte oder es muss eine geringere Zeitschrittweite in der Kopplung verwendet werden. Das Ausmaß und die Existenz eines zeitlichen Vorteils durch Parallelisierung hängt von mehreren Einflussfak-

toren ab. Diese sind:

- die Anzahl der zu lösenden Gleichungssysteme
- die Erhöhung der Anzahl benötigter Iterationen bis zum Erreichen des Gleichgewichts im Vergleich zu Verfahren mit höherer Konvergenzordnung in eng gekoppelten Berechnungen
- das Verhältnis der Berechnungszeiten der einzelnen Solver.

Je höher die Anzahl zu lösender Gleichungssysteme, desto höher ist der zeitliche Vorteil einer parallelen im Vergleich zu einer sequentiellen Abarbeitung. Der Zeitbedarf einer Kopplungsiteration entspricht bei paralleler Berechnung dem der zeitlich aufwändigsten Gleichungssystemlösung. Dementsprechend steigt der Geschwindigkeitsvorteil je näher die Berechnungsdauer der gekoppelten Programme aneinander liegt, und schwindet, je weiter diese voneinander entfernt sind.

Gauß-Seidel Verfahren

Im Gauß-Seidel- oder Einzelschrittverfahren wird analog zum Jacobi-Verfahren jede Gleichung eines Gleichungssystems nach je einem zu berechnenden Freiheitsgrad aufgelöst. Dessen aktuelle Näherungslösung wird im Gegensatz zum Jacobi-Verfahren nicht ausschließlich mit Näherungslösungen der übrigen Freiheitsgrade der vorangegangenen Iteration, sondern soweit Verfügbar mit den Näherungslösungen der aktuellen Iteration berechnet. Diese können als bessere Näherung an das Endergebnis als die Werte der vorangegangenen Iteration angesehen werden. In Abbildung 2.3 ist der Ablauf einer transienten, nach dem Gauß-Seidel-Verfahren durchgeführten gekoppelten Berechnung dargestellt. Zwei gekoppelt betriebene Berechnungsprogramme oder Gleichungssysteme werden nacheinander aufgerufen. Stehen bereits Ergebnisse der aktuellen Zeitschrittitation anderer Gleichungssysteme zur Verfügung, werden diese anstelle der aus dem vorangegangenen Zeitschritt verwendet.

Die höhere Güte der somit verfügbaren Randwerte führt zu einer erhöhten Stabilität der gekoppelten Berechnung (vgl. [28]). Die Ergebnisextrapolation für den folgenden Zeitschritt wird nur für eines der Programme bzw. Gleichungssysteme durchgeführt. Der

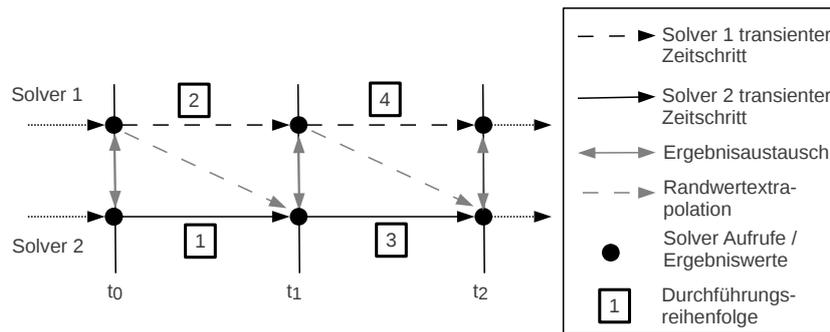


Abbildung 2.3: Schema einer nach dem Gauß-Seidel-Verfahren durchgeführten gekoppelten Simulation.

Algorithmus ist aufgrund der notwendigen seriellen Abarbeitung nicht parallelisierbar. Analog zum Jacobi-Verfahren lassen sich die Eigenschaften des Verfahrens bei Iteration über die zu berechnenden Zeitschritte auf die Gleichgewichtssiterationen eng gekoppelter Berechnungen (vgl. Abschnitt 2.1.4) übertragen.

Das Verfahren weist eine höhere Konvergenzordnung als das Jacobi-Verfahren auf. Daher wird im Allgemeinen eine geringere Anzahl an Iterationen zur Lösung der gekoppelten Problemstellung als bei diesem in eng gekoppelten Berechnungen benötigt. In schwach gekoppelten Berechnung steigt die Ergebnisgüte oder es kann eine größere Zeitschrittweite der Kopplung gewählt werden. Dem entgegen steht der zeitliche Nachteil durch die sequentielle Lösung der Gleichungssysteme.

Wird die Multiphysikberechnung durch Einbindung von kommerziellen Black-Box-Berechnungsprogrammen durchgeführt, stehen neben der rein zeitlichen Perspektive auch die im Regelfall hohen Lizenzkosten im Fokus. Hier führt die höhere Konvergenzordnung des Gauß-Seidel-Verfahrens zu einer geringeren Anzahl an Iterationen. Hierdurch werden die benötigten Software-Ressourcen verringert. Darüber hinaus lassen sich auch Problemstellungen mit stärkeren Feldinteraktionen berechnen, als dies nach dem Jacobi-Verfahren möglich ist.

2.1.4 Zeitintegrationsverfahren in transienten partitionierten Berechnungen

In transienten partitionierten Multiphysiksimulationen kann die Zeitintegration in zwei Arten, die eng und die schwach gekoppelten Verfahren eingeteilt werden. Die in diesem Abschnitt getroffenen Unterscheidungen werden in Anlehnung an u.A. [15], [29] und [45] durchgeführt. Die zeitliche Integration der Gleichungen innerhalb der Berechnungsprogramme wird nicht betrachtet und als stabil vorausgesetzt. Der Begriff der Zeitintegration beschreibt in dieser Arbeit die Extrapolation der zwischen den eingebundenen Programmen ausgetauschten Ergebnisvektoren für einen neuen Zeitschritt einer transienten, gekoppelten Berechnung.

Schwach gekoppelte Verfahren

Schwach gekoppelte partitionierte Verfahren lassen sich in Analogie zu expliziten numerischen Zeitintegrationsverfahren beschreiben. Häufig werden sie dementsprechend auch als explizite Kopplungsverfahren bezeichnet (vgl. u.A. [45], [28], [21]). Pro Zeitschritt wird das Gleichungssystem für jedes der zu behandelnden physikalischen Felder einmalig gelöst. Daher werden diese Verfahren unter anderem auch als einfach gestaffelte Verfahren bezeichnet. Die Randwerte für die separaten Gleichungssysteme sind extrapolierte Werte der Ergebnisse der anderen Gleichungssysteme aus den vorangegangenen Zeitschritten. Die Differentialgleichung wird in Analogie expliziter numerischer Zeitintegrationsverfahren zum Zeitpunkt t_n gelöst, auf deren Basis das Ergebnis für den Zeitpunkt t_{n+1} errechnet wird. Es werden keine zeitschrittinternen Gleichgewichtssiterationen ausgeführt. Dies führt in gekoppelten Problemstellungen mit starken Feldinteraktionen zu mangelhafter Stabilität der Berechnung (z.B. [2]). Durch Wahl einer ausreichend kleinen Zeitschrittweite (vgl. [49], [35]) und geeigneter zeitlicher Integrationsverfahren (vgl. [21]) kann problemstellungsabhängig hohe Präzision erreicht werden. Schematisch dargestellt ist das Verfahren in Abbildung 2.4. Dabei werden die grau dargestellten Gleichgewichtssiterationen nicht durchgeführt. Nach Berechnung aller Einzelfeldgleichungssysteme wird ohne Gleichgewichtsüberprüfung in den nächsten Zeitschritt gesprungen. Je nach Kopplungsschema läuft die Berechnung wie in den Abbildungen 2.2 oder 2.3 dargestellt ab.

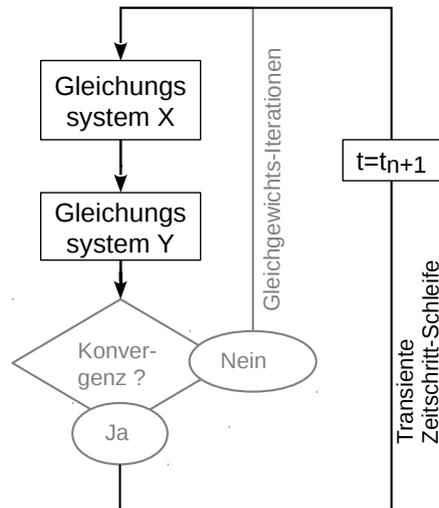


Abbildung 2.4: Kombiniertes Schema einer schwach (nur schwarze Elemente) bzw. eng (um graue Elemente erweitert) gekoppelten Berechnung nach dem Gauß-Seidel-Verfahren.

Eigenschaften schwach gekoppelter Verfahren sind:

- Statische Berechnungen sind aufgrund fehlender Gleichgewichtsiterationen nicht möglich.
- Die Berechnung ist bedingt stabil. Für Fluid-Struktur-Interaktionsberechnungen z.B. kann ein kritisches Massenverhältnis zwischen Fluid und Solid berechnet werden (vgl. [18]), ab dem eine gekoppelte Berechnung instabil wird. Eine Reduzierung der verwendeten Kopplungszeitschrittweite oder einer zeitlichen Integration höherer Ordnung kann entgegen der Effekte auf explizite numerische Verfahren zu weiterer Erhöhung der Instabilität führen (vgl. [27], [34], [55]).
- Wegfallende Gleichgewichtsiterationen bieten bei ohnehin gewünschter guter zeitlicher Auflösung einer Problemstellung teilweise deutliche Geschwindigkeitsvorteile.

Die Bestimmung der kritischen Zeitschrittweite der Kopplungsvorgänge, die zur Erhaltung ausreichender Genauigkeit der Ergebnisse benötigt wird, kann durch ein Verfahren zur Integration über der Zeit wie z.B. eingebettete Runge-Kutta Verfahren angelegte Methoden erreicht werden. Durch Ergebnisextrapolation mithilfe von Funktionen unterschiedlicher Ordnung kann die Extrapolationsgüte abgeschätzt werden.

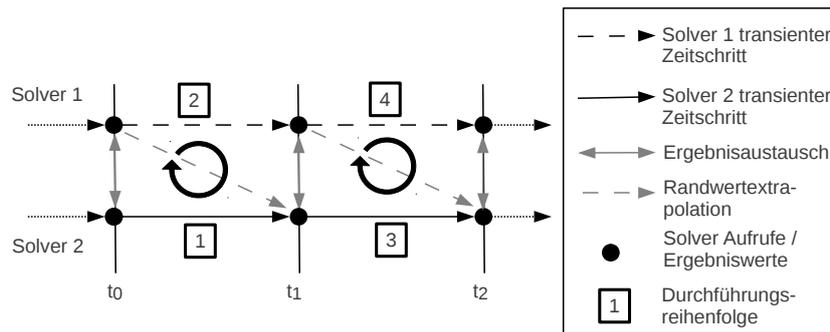


Abbildung 2.5: Ablaufschema einer um Gleichgewichtsiterationen erweiterten gekoppelten Berechnung nach dem Gauß-Seidel-Verfahren.

Eng gekoppelte Verfahren

Eng gekoppelte Verfahren werden auch als implizite Verfahren bezeichnet ([45], [46]). Sie weisen vergleichbare Eigenschaften wie implizite Algorithmen in der numerischen Mathematik auf. Pro Zeitschritt werden mehrere Gleichgewichtsiterationen zwischen den Gleichungssystemen durchgeführt bis ein statisches Gleichgewicht für den betreffenden Zeitschritt erfüllt ist. Analog zu den aus der Numerik bekannten impliziten Verfahren wird die Differentialgleichung für den Zeitpunkt t_{n+1} aufgelöst und das Gleichgewicht zwischen den Randwerten bzw. den gekoppelten Gleichungen zu diesem Zeitpunkt bestimmt. Die Randwerte für die separaten Gleichungssysteme sind Ergebnisse der anderen Gleichungssysteme aus dem aktuellen Zeitschritt. In Abbildung 2.4 auf Seite 18 spiegelt sich die enge Kopplung durch Hinzufügen der in grau dargestellten Gleichgewichtsschleife wieder. Nach Berechnung aller Einzelfeldgleichungssysteme wird eine Gleichgewichtsüberprüfung durchgeführt. Sind die Lösungen der Einzelfeldgleichungssysteme nicht miteinander im Gleichgewicht, wird bis zu dessen Erreichen jeweils eine weitere Iteration mit Berechnung aller Gleichungssystem im aktuellen Zeitschritt durchgeführt. In statischen Berechnungen wird die in schwarz dargestellte transiente Zeitschrittsschleife weggelassen und lediglich an dem betrachteten statischen Punkt das Gleichgewicht zwischen den eingebundenen Programmen gesucht. Durch die Berechnung des Gleichgewichtes zwischen den Programmen weisen eng gekoppelte Verfahren in der Regel höhere Stabilität als schwach gekoppelte Verfahren auf (vgl. [8], [19]). Die Anzahl der benötigten Iterationen hängt von der Güte der vorgegebenen Startwerte für die gekoppelte Berechnung ab.

Im ersten Zeitschritt ist diese nicht beeinflussbar, da die Werte vorgegeben werden müssen. Danach steigt die Güte im Regelfall mit

- Verkürzung der Zeitschrittweite (vgl. [9])
- Einsatz von Extrapolationsverfahren mit höherer Genauigkeit (vgl. [21])

bei ansonsten gleichbleibenden Modelleigenschaften.

In Abbildung 2.5 ist das Ablaufschema einer eng gekoppelten Berechnung nach dem Gauß-Seidel-Verfahren dargestellt. Das Ablaufschema der schwach gekoppelten Berechnung aus Abbildung 2.3 ist darin um die genannte iterative Berechnung der Zeitschritte erweitert. Eigenschaften eng gekoppelter Verfahren sind:

- Sowohl statische als auch dynamische Berechnungen sind durch die zeitschrittinternen Gleichgewichtssiterationen möglich.
- Anfangswerte für transiente Berechnungen können errechnet werden.
- Die Berechnung ist bedingt konvergent.
- Die Ergebnisgüte gleicht der der monolithischen Verfahren (vgl. [3], [49]).
- Die Zeitschrittweite ist durch die notwendige Auflösung physikalischer Phänomene, wie z.B. Verformungsvorgängen im nichtlinearen Materialbereich oder Benutzeranforderungen beschränkt. Die erhöhte Stabilität der Berechnung im Vergleich zu schwach gekoppelten Verfahren erlaubt Zeitschrittweiten die zu einem vielfachen der Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl führen (vgl. [49])

2.1.5 Ansteuerung der Solver und Datenübergabemethoden in programmexternen Multiphysiksimulationen

Wird die Analyse einer Multiphysikproblemstellung durch die programmexterne Methode gelöst, muss das Kopplungsprogramm Prozesskommunikation und -ablauf steuern (vgl. Abschnitt 2.1.2). Die Methoden können in zwei Ausprägungen eingeteilt werden.

Verwendung von Application Programming Interfaces

Viele am Markt verfügbare Berechnungsprogramme stellen Application Programming Interfaces (APIs) bereit. Diese Schnittstellen erlauben eine Verwendung des Programms als Objekt im Kontext der objektorientierten Programmierung. Die APIs sind dabei in der Regel programmspezifisch aufgebaut. Abhängig von der Ausprägung des APIs kann das aufrufende Kopplungsprogramm verschiedene Aktionen (Methoden) des Solvers direkt ausführen oder diesem Daten (Eigenschaften) zur Verfügung stellen bzw. Daten des Solvers auslesen. Die Solver können hierdurch, im Idealfall eines umfangreichen APIs, während des Programmlaufs in ausreichendem Umfang gesteuert werden. Veränderte Randwerte oder eine Veränderung der Zeitschrittweite sind somit prinzipiell ohne einen Neustart des Solvers möglich. Eigenschaften der Kopplung durch die Verwendung von APIs sind:

- Die Berechnungsprogramme können während der gesamten gekoppelten Berechnung laufen und müssen nicht mehrmals aufgerufen werden. Mehrfacher interner Aufbau des Gleichungssystems durch Programmneustart kann entfallen.
- Nicht alle Programme bieten APIs mit ausreichendem Methodenumfang an.
- Grundsätzliche Modellparameter, wie Elemente, Geometrie oder Materialparameter, lassen sich in der Regel, während ein Berechnungsprogramm läuft, nicht ändern. Diese Parameter können nicht als Kopplungsvariablen verwendet werden.
- Modellimmanente, zeitabhängige Zustandsvariablen können in vielen Programmen nicht über das API zurückgesetzt werden. Eine enge Kopplung (vgl. Abschnitt 2.1.4, S. 19) kann in diesem Fall nicht realisiert werden.
- Die Erstellung von Programmcode zur Verwendung von APIs setzt gute Programmierkenntnisse voraus, da diese in der Regel in der vom Berechnungsprogramm vorgegebenen Programmiersprache durchgeführt werden muss. Die Flexibilität des partitionierten Berechnungsschemas wird hierdurch eingeschränkt.
- Bei vorhandenen APIs und deren Anbindung bei Programmerstellung kann die Handhabung der Ablaufsteuerung vereinfacht werden.

Ansätze zur Standardisierung von APIs wie das Functional Mock-up Interface ([33]) definieren grundlegende Schnittstelleneigenschaften. Es wird angestrebt, durch eine universelle API-Schnittstelle den notwendigen Programmieraufwand bei der Einbindung zusätzlicher Berechnungsprogramme zu senken. Aktuell befinden sich diese Schnittstellen im Aufbau, eine generelle Einsetzbarkeit ist nicht gegeben.

Alternative Ansätze, wie die Implementierung von zusätzlichen APIs, wie dies u.A. im Kopplungsprogramm MpCCI[®]([43]) durchgeführt wird, erfordern Anpassungen innerhalb der anzubindenden Programme, und sind somit nicht als generell einsetzbar einzustufen.

Verwendung von Systemaufrufen

Wird die Prozesskommunikation über ASCII-Dateien realisiert, werden die Berechnungsprogramme für jede Iteration neu aufgerufen. Während des internen Preprocessings lesen diese das Modell inklusive aller Parameter und Randwerte aus ASCII-Dateien ein. Diese Dateien werden durch das Kopplungsprogramm vor dem Solveraufruf so manipuliert, dass die Ergebnisse der anderen eingebundenen Berechnungsprogramme als Randwerte für den aufzurufenden Solver in dessen Problemstellungsdefinitionsdatei z.B. als element-spezifische Werte vorhanden sind. Der Aufruf der Berechnungsprogramme erfolgt durch Systemaufrufe des Kopplungsprogramms. Merkmale der Ansteuerung über Systemaufrufe und ASCII-Dateien sind:

- Nahezu alle derzeit erhältlichen Berechnungsprogramme bieten die Möglichkeit, ASCII-formatierte Dateien einzulesen und herauszuschreiben.
- Es können ohne Einschränkungen alle Modellparameter während der gekoppelten Berechnung verändert werden, da die Berechnungsprogramme in jeder Iteration neu gestartet werden.
- Die Gleichungssysteme müssen in jeder Kopplungsiteration neu aufgebaut werden, was zum Teil erheblichen zeitlichen Aufwand bedeutet.

- Zur benötigten Manipulation der Eingangsdaten der Berechnungsprogramme können weit verbreitete, frei wählbare Skriptsprachen verwendet werden. Die Anfertigung bzw. Anpassung von Skripten an neu einzubindende Programme kann auch durch den Nutzer des Kopplungsprogramms durchgeführt werden.
- Die Anbindung zusätzlicher Berechnungsprogramme erfordert Programmierkenntnisse.
- Der Neustart der Programme in jedem Zeitschritt und jeder Kopplungsiteration ist zeitaufwändig.

2.1.6 Aktuell in der Praxis eingesetzte Verfahren

Gegenwärtig ist ein diversifiziertes Angebot an Programmen und darin umgesetzten Grundkonzepten für den Bereich der Multiphysiksimulation verfügbar. Die Umsetzung richtet sich sowohl nach Nutzeranforderungen als auch nach der strategischen Ausrichtung der programmierstellenden Institutionen. Da die Vorstellung konkreter Programmpakete nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit steht, seien ohne Anspruch auf Vollständigkeit einige Konzepte genannt:

- Erweiterungen von bestehenden Einzelphysikberechnungsprogrammen um zusätzliche physikalische Felder
- Bereitstellung von Schnittstellen zur Anbindung anderer Berechnungsprogramme an Einzelphysikberechnungsprogramme
- Reine Multiphysikberechnungsprogramme, die ein möglichst breites Feld an behandelbaren Problemstellungen abzudecken versuchen
- Multiphysik-Kopplungsumgebungen, die Schnittstellen zum Einbinden verfügbarer Einzelphysikberechnungsprogramme bieten.

2.2 Stabilisierungsverfahren

2.2.1 Notwendigkeit von Stabilisierungsalgorithmen

Wie in Abschnitt 2.1.1 auf Seite 5 dargestellt, ist abhängig von Modellgröße und Art der gekoppelt zu lösenden Gleichungssysteme eine monolithische Formulierung der Problemstellung nicht effizient praktikabel. Der Aufwand im Vergleich zur Simulation eines einzigen physikalischen Feldes steigt stark an. In diesen Fällen bietet sich die Verwendung des partitionierten Schemas an. Der numerische Aufwand, der durch ein partitioniertes Verfahren zur Lösung der Problemstellung aufgewendet werden muss, hängt von mehreren Faktoren ab. Durch den Kopplungsalgorithmus nur mittelbar beeinflussbar, benötigen die gekoppelt zu berechnenden Teilproblemstellungen eine bestimmte Zeitdauer für eine Lösung. Sofern die übergebenen Ergebniswerte weniger stark von der endgültigen Lösung abweichen, kann sich die Berechnungsdauer in den einzelnen Solvern verkürzen. Bei relativ starken Fehlern kann es in den Berechnungsprogrammen zu verringerter Effizienz des eingesetzten Lösungsverfahrens kommen. Dies führt zu einer Erhöhung der benötigten Rechenzeit.

Wie häufig die eingebundenen Programme in der partitionierten gekoppelten Multiphysiksimulation ausgeführt werden müssen, die der Anzahl der benötigten Kopplungsiterationen bis zum Erreichen der Konvergenz $i_{Konvergenz}$ entspricht, ist abhängig von

- der Kondition der gekoppelten Problemstellung (vgl. Abschnitt 2.1.1, S. 8 ff.)
- der Höhe des Fehlers in den Startwerten für die gekoppelte Simulation statischer Berechnungen
- der Höhe des Fehlers in den extrapolierten Randwerten für neue Zeitschritte in transienten, eng gekoppelten Berechnungen.

Der Ablauf der Gleichgewichtsiterationen nach einem Fixpunktiterationsverfahren ist in Abbildung 2.6 dargestellt.

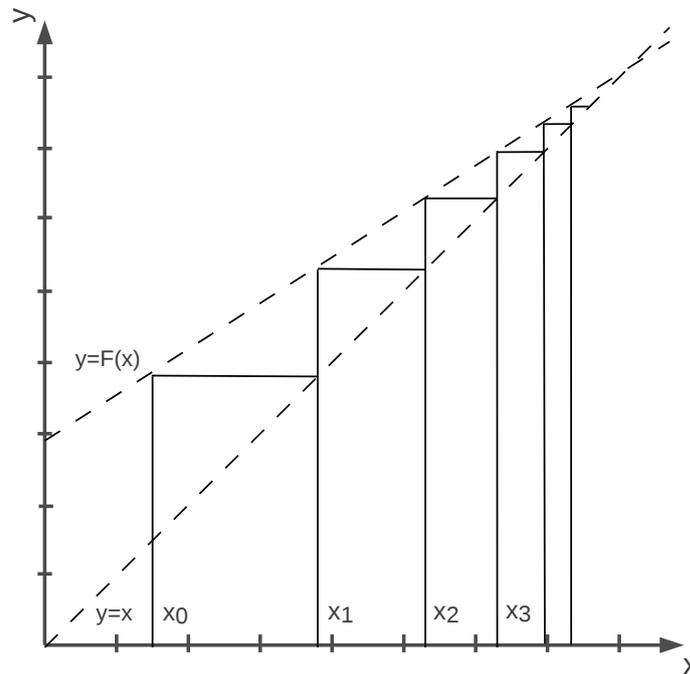


Abbildung 2.6: Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung.

Die zu lösende Gleichung wird dabei auf die Form

$$F(x) - x = 0 \quad (2.4)$$

gebracht. Die daraus folgende Iterationsvorschrift lautet

$$x_{i+1} = F(x_i). \quad (2.5)$$

Die Lösung der Gleichung ist der Fixpunkt, in dem x über $F(x)$ auf sich selbst abgebildet wird. Der Fixpunkt ist in der Abbildung der Schnittpunkt von $y = x$ mit $y = F(x)$. Die Lösung der Funktion $F(x)$ mit einem gewählten Startwert x_0 wird als neuer, verbesserter Startwert für eine erneute Lösung von $F(x)$ angenommen. Es ist zu erkennen, dass näher am Endergebnis liegende Startwerte für x_0 die Anzahl der benötigten Iterationen verringern. Weiter ist zu erkennen, dass die Berechnung schneller konvergiert für abnehmende Werte von $|\frac{dF(x)}{dx}|$. Die Gleichung ist mit abnehmenden Werten von $|\frac{dF(x)}{dx}|$ zunehmend besser konditioniert. Für $|\frac{dF(x)}{dx}| > 1$ wird der Fixpunkt abstoßend, es kann keine Lösung der Gleichung durch die gewählte Iterationsvorschrift errechnet

werden. In den Fixpunktiterationsverfahren zur partitionierten Multiphysiksimulation wird die Lösung dem entsprechend als erreicht angesehen, wenn sich die Ergebnisse aufeinanderfolgender Iterationen nur noch unterhalb einer Toleranzgrenze unterscheiden. Die Ergebnisse der vorangegangenen Iteration werden in diesem Fall auf sich selbst abgebildet.

Wird in einer statischen Berechnung oder einem Zeitschritt einer eng gekoppelten transienten Berechnung nach den Fixpunktiterationsverfahren eine bestimmte Anzahl an Iterationen benötigt, errechnet sich bei Verwendung eines Gauß-Seidel Kopplungsschemas (vgl. Abschnitt 2.1.3, S.15) die benötigte Zeitdauer der Berechnung zu

$$t_{Konvergenz} \approx i_{Konvergenz} \cdot (t_{Gleichungssystem\ 1} + \dots + t_{Gleichungssystem\ n}). \quad (2.6)$$

Stabilisierungsalgorithmen zielen darauf ab $i_{Konvergenz}$ zu reduzieren sowie in nicht konvergenten, kopplungsbedingt schlecht konditionierten gekoppelten Berechnungen, das Erreichen von Konvergenz zu ermöglichen. Ein effektiver Stabilisierungsalgorithmus ermöglicht es, in den in Abschnitt 2.2.2 genannten Grenzen, auch kopplungsbedingt schlecht konditionierte Problemstellungen durch Verringerung des Einflusses fehlerbehafteter Nutzervorgaben in den Startwerten zu berechnen. In eng gekoppelten transienten Berechnungen führt die Reduktion des Fehlereinflusses zu einer möglichen Erhöhung der zulässigen Zeitschrittweite, da der mit der Zeitschrittweite steigende Fehler der Ergebnisextrapolation bzw. der numerischen Integration geringere Auswirkungen auf den Berechnungsablauf hat.

Um generell einsetzbar zu sein, sollte ein Stabilisierungsverfahren

- Anwendbarkeit in Problemstellungen mit in der Praxis vorkommender Anzahl von Freiheitsgraden aufweisen
- Anwendbarkeit bei beliebigen miteinander gekoppelt zu betrachtenden physikalischen Feldern aufweisen
- das Endergebnis der Berechnung nicht verfälschen
- weitestgehende Berechenbarkeit auch durch starke Wechselwirkungen zwischen den betrachteten physikalischen Feldern geprägte Problemstellungen ermöglichen
- Softwareressourcen schonen, um unnötig starke Beanspruchung gegebenenfalls mit hohen Lizenzkosten behafteter Programmlizenzen zu vermeiden

- Hardwareressourcen schonen, um auch bei großen Problemstellungen einsetzbar zu sein
- geringe Anforderungen an die Kenntnisse des Benutzers zum korrekten Betrieb des Verfahrens stellen
- für den Benutzer gut interpretierbare Berechnungsoperationen ausführen, um plausibilisierbare Ergebnisse zu erzeugen
- lediglich Anforderungen an die Berechnungsprogramme stellen, die ohnehin zu deren Kopplung notwendig sind.

2.2.2 Grenzen von Stabilisierungsverfahren

Durch den Einsatz von Stabilisierungsverfahren kann kopplungsbedingt schlechtes Konvergenzverhalten in den betrachteten Fixpunktverfahren (Gauß-Seidel oder Jacobi) verbessert werden. Allerdings bleiben auch unter Einsatz dieser Verfahren Grenzen für die Berechenbarkeit von Problemstellungen erhalten.

Weist die gekoppelte Berechnung schlechte Konvergenzeigenschaften auf, ist ihre Lösung aufwändig. Im Extremfall kann keine Lösung der Berechnung erreicht werden. Es bestehen im Bereich des aufzufindenden Fixpunktes starke Rückwirkung bereits geringer Fehler in den Rand-/ bzw. Startwerten der Kopplungsiteration auf die aktuelle Näherungslösung (vgl. Abbildung 2.6). Stabilisierungsverfahren zielen darauf ab, den Einfluss des Fehlers in Rand- und Startwerten zu verringern und somit die Kondition der Problemstellung zu verbessern. Bei zu schlechter Kondition ist die mögliche Einflussnahme ohne Modifikationen an den eingebundenen Berechnungsprogrammen jedoch nicht ausreichend, um in einer endlichen Iterationsanzahl das Ergebnis mit der gewünschten Genauigkeit zu berechnen.

Darüber hinaus sind Fixpunktiterationsverfahren im Regelfall nur lokal konvergent. Die in der Berechnung verwendeten Startwerte müssen in einem ausreichend kleinen Bereich um den gesuchten Fixpunkt liegen, um konvergentes Verhalten zu ermöglichen. Dieser Bereich wird als Konvergenzradius bezeichnet. Nähere Informationen hierzu finden sich in Abschnitt 3.2.1 ab Seite 40. Dies trifft über das hier betrachtete Gauß-Seidel-Verfahren hinaus auch auf weitere Verfahren höherer Ordnung zu (vgl. [47]).

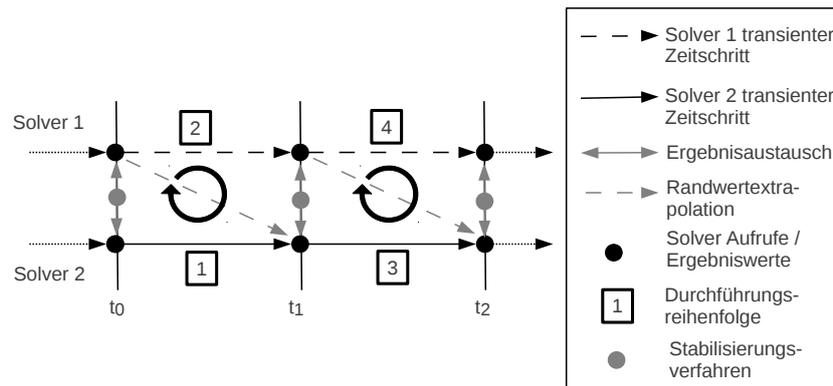


Abbildung 2.7: Ansatzpunkt von Stabilisierungsverfahren in der partitionierten Multiphysiksimulation am Beispiel einer gekoppelten Simulation nach der Gauß-Seidel-Methode.

2.2.3 Arbeitsweise von Stabilisierungsverfahren

In der partitionierten Multiphysiksimulation stehen nach jeder Ausführung der eingebundenen Berechnungsprogramme deren Ergebnisse zur Verfügung. In der grundlegenden Implementierung einer gekoppelten Berechnung werden die Ergebnisse direkt an andere, ebenfalls eingebundene Berechnungsprogramme, übergeben. Das um den Einsatz eines Stabilisierungsverfahrens erweiterte, eng gekoppelte Gauß-Seidel-Verfahren (s. Abbildung 2.5, S.19) ist in Abbildung 2.7 dargestellt. Die übergebenen Ergebnisse werden nicht direkt zwischen den Programmen ausgetauscht, sondern zuvor durch das Stabilisierungsverfahren modifiziert. Das Ziel ist die Abweichung der derzeitigen Lösung vom angestrebten Endergebnis durch Manipulation der übergebenen Daten schneller zu reduzieren als dies ohne Einsatz von Stabilisierungsverfahren durch den einfachen Iterationsprozess geschehen würde.

2.2.4 Bekannte Verfahren

In diesem Abschnitt werden zunächst ausgewählte, bereits in Forschung und praktischen Einsatz befindliche Stabilisierungsverfahren vorgestellt, die keine Änderungen an den eingebundenen Programmen erfordern und keine speziellen Anforderungen an die eingebundenen Programme stellen. Anschließend werden exemplarisch zwei Verfahren

vorgestellt, die spezielle Anforderungen an die eingebundenen Programme stellen und auf Modifikationen der zu berechnenden Modelle angewiesen sind. Abschließend wird eine kurze Zusammenfassung des Abschnitts durchgeführt.

Statisches Relaxationsverfahren

Statische Relaxationsverfahren werden als SOR (Successive Over Relaxation) oder SSOR (Symmetric Successive Over Relaxation) in der numerischen Mathematik zur Lösung linearer Gleichungssysteme eingesetzt. Darin wird ein Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung um eine Unter- oder Überrelaxation erweitert. Die Veränderung der Näherungslösungen zweier aufeinander folgender Iterationen wird um einen Faktor ω skaliert. Dies ist als Erweiterung der in Abbildung 2.6 dargestellten grundlegenden Ausprägung eines Fixpunktiterationsverfahrens in Abbildung 2.8 dargestellt. Durch die Skalierung der Veränderung zwischen zwei nacheinander berechneten Werten für x_n verändert sich das Verhalten der Gleichung. Wird der Wert von ω geeignet gewählt, erscheint der Wert von $|\frac{dF(x)}{dx}|$ als abgesenkt (Gerade $y = F_\omega(x)$). Die Kondition der Problemstellung wurde somit verbessert. ω muss im allgemeinen voreingestellt werden und wird über der iterativen Berechnung sowie dem zu berechnenden Feld konstant gehalten. Die Berechnungsvorschrift dieses Verfahrens ist

$$x_{i\omega} = x_{i-1} + \omega(x_i - x_{i-1}). \quad (2.7)$$

Für tiefergehende Erläuterungen zur Funktionsweise sei auf die entsprechende Fachliteratur (z.B. [11], S.561 ff.) verwiesen.

Es lässt sich zeigen, dass

$$\omega \in]0, 2[$$

gewählt werden muss (vgl. [11], [25]), um keine Destabilisierung der Berechnung hervorzurufen. In Abbildung 2.9 ist anhand einer ausgewählten Parametrisierung des gekoppelten Berechnungsmodells aus Abschnitt 5.2.1 (S.66) der Einfluss des gewählten statischen Relaxationsparameters auf die benötigte Anzahl der Iterationen bis zum Erreichen der Konvergenz aufgetragen. Bei 250 Iterationen wird die Berechnung abgebrochen. $\omega = 1$ entspricht dem unrelaxierten Gauß-Seidel-Verfahren.

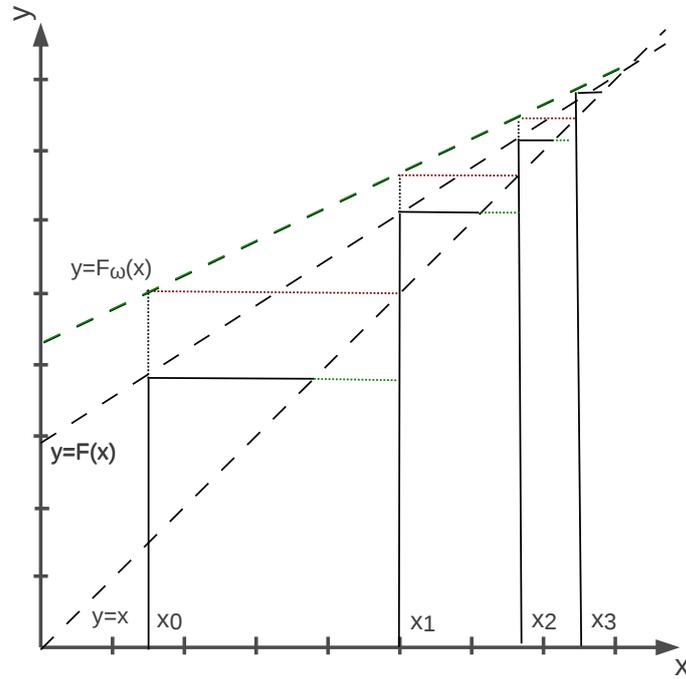


Abbildung 2.8: Relaxiertes Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung.

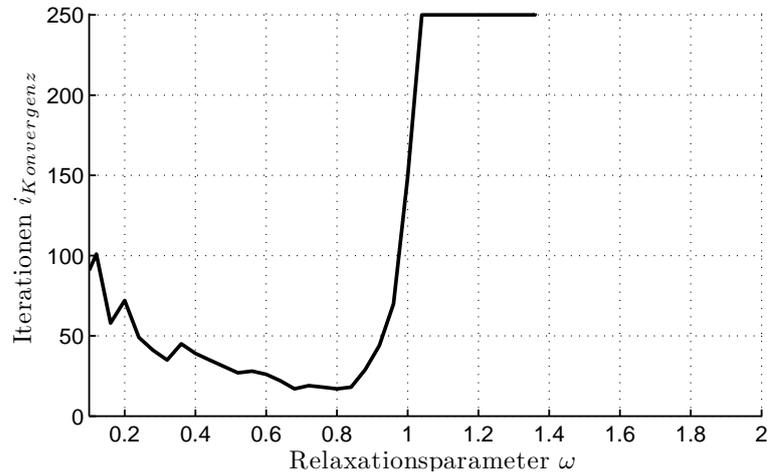


Abbildung 2.9: Benötigte Iterationen bis zum Erreichen der Konvergenz über dem angewendeten statischen Relaxationsfaktor für das Modell "lineare Wärmeleitungs- Wärmestrahlungskopplung" aus Kapitel 5.

Die optimale Wahl von ω , ω_{opt} , entscheidet über die Existenz und Höhe eines Effizienzvorteils im Vergleich zur unrelaxierten Berechnung. In dem ausgesuchten Beispiel in Grafik 2.9 steigen die benötigten Iterationen bis $\omega = 1,05$ stark an, danach wird eine oberhalb der gewählten Grenze liegende Anzahl an Iterationen zum Erreichen der Konvergenz benötigt. Ab $\omega \geq 1,38$ bricht die gekoppelte Berechnung aufgrund von Zahlenwerten oberhalb der in der gewählten numerischen Genauigkeit der Berechnung darstellbaren Ergebnissen ab. Für andere Modelle mit abweichenden Berechnungseigenschaften müssen problemspezifisch Faktoren für ω gewählt werden. Der aus Abbildung 2.9 ablesbare optimale Wert kann dort zu Verschlechterung der Kondition der gekoppelten Berechnung führen.

ω_{opt} hat die folgenden Eigenschaften ([25]):

- ω_{opt} ist im Voraus im Allgemeinen nicht bekannt.
- ω_{opt} kann sich während einer Berechnung verändern.
- ω_{opt} ist spezifisch für jede gekoppelte Ergebnisgröße.

Die Wahl von ω erfordert dementsprechend Verständnis über die Einzelberechnungen und das Kopplungsverhalten von einem Anwender des Verfahrens oder macht Testberechnungen zur Bestimmung des geeigneten Wertes für den Relaxationsparameter notwendig. Eine ungeeignete Parametrisierung kann zu einer Verschlechterung der Konvergenzeigenschaften führen. Manuelle, spezifische Einstellungen für die gekoppelten Ergebnisgrößen sind vor dem Hintergrund von Modellen mit hoher Anzahl an Freiheitsgraden durch den hohen Aufwand als nicht möglich anzusehen.

Der Speicherplatzbedarf sowie der numerische Aufwand zur Durchführung der Relaxation sind gering, da nur einige wenige mathematische Berechnungen erforderlich sind. Die durchgeführten Operationen durch das Stabilisierungsverfahren lassen sich in einer Plausibilitätsprüfung gut nachvollziehen.

Extrapolationsverfahren

Extrapolations- bzw. Konvergenzbeschleunigungsverfahren wie z.B. das Aitken- Δ^2 -Verfahren (vgl. [36], S.205 ff.) errechnen aus einer Anzahl aufeinanderfolgend durch den gekoppelten Prozess iterativ errechneter Werte einen zu erwartenden Ergebniswert. Sie erzeugen dabei idealerweise eine schneller konvergierende Folge von Ergebniswerten als die des ursprünglichen Prozesses. Dies ist schematisch in Abbildung 2.10 dargestellt. Nachdem zwei Iterationen durch das grundlegende Iterationsverfahren durchgeführt wurden, wird auf den zu erwartenden Ergebniswert extrapoliert. Die Grundannahmen der Extrapolationsformel treffen für die in der Abbildung dargestellten Gleichung exakt zu, sodass direkt die gesuchte Lösung errechnet wird. Die Extrapolation ist in der Abbildung durch den Pfeil dargestellt.

Je weiter das Verhalten der realen gekoppelten Berechnung von den Annahmen eines eingesetzten Extrapolationsverfahrens abweicht, desto geringer ist der erzielbare Effizienzgewinn. Bei großen Abweichungen kann der Einsatz von Extrapolationsverfahren Divergenz der gekoppelten Berechnung hervorrufen. Beispielhaft kann die Anwendung einer rekursiven Implementierung des Aitken- Δ^2 -Verfahrens genannt werden, die in [26] untersucht wird. Die Anzahl der Iterationen kann demnach durch Einsatz des Verfahrens in der untersuchten Problemstellung deutlich reduziert werden. Dem entgegen steht die Untersuchung in [52]. Auf die dortige Problemstellung angewendet führte das gleiche Verfahren zu einer Vermeidung von divergentem Verhalten, führte jedoch nicht zu einer Lösung der Problemstellung. Die abweichenden Ergebnisse lassen sich auf die unterschiedlichen Konvergenzeigenschaften der untersuchten Modelle zurückführen. In Berechnungen, die mit starken Nichtlinearitäten behaftet sind, kann der Einsatz des Verfahrens, wie oben genannt, zu Divergenz führen. Zur anschaulichen Darstellung der Problematik wird von einem Modell mit sprunghaften Übergängen der Steifigkeit durch Kontaktphänomene oder starker Änderung der Wärmekapazität von Fluiden am Schmelzpunkt ausgegangen. Extrapolationsverfahren zielen im Allgemeinen auf möglichst nahe an das Endergebnis extrapolierendes Verhalten ab. Die iterativ erlangte Ergebniskurve der Berechnung auf einer Seite dieser Nichtlinearitäten, z.B. vor der Erstarrung des Fluides lässt jedoch kaum Rückschlüsse auf den Verlauf der Ergebniskurve hinter dieser Stelle zu.

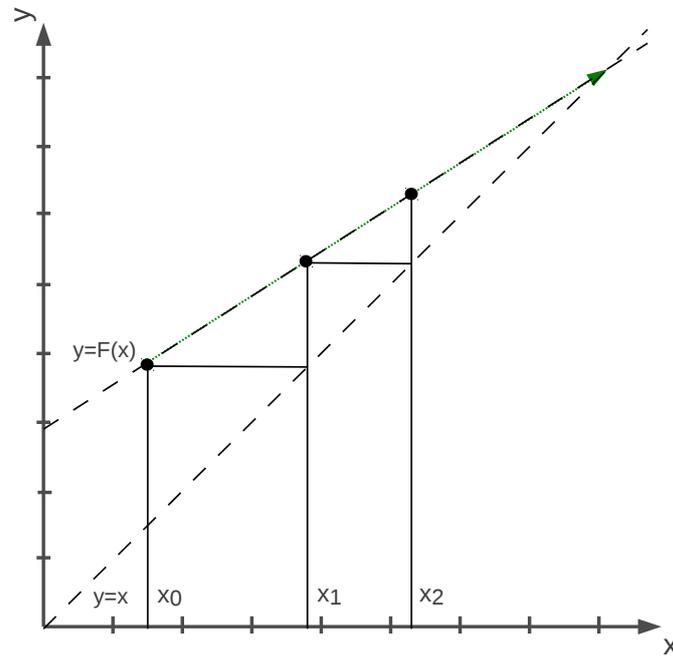


Abbildung 2.10: Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung unter Einsatz eines Extrapolationsverfahrens.

Die grundlegenden Annahmen des Extrapolationsverfahrens beinhalten diese Verhaltensänderung nicht und führen somit unter Umständen zu stark fehlerbehafteten Extrapolationsergebnissen. Liegen diese außerhalb des Konvergenzradiuses der gekoppelten Berechnung, führt dies zu divergentem Verhalten der Berechnung.

Wird der extrapolierte Ergebniswert in einen Skalierungsfaktor für die Veränderung zwischen zwei aufeinanderfolgend berechneten Ergebnisse umgerechnet, kann die Extrapolation als dynamisches Relaxationsverfahren interpretiert werden (vgl. [26], [25]). Um die Stabilitätsgrenzen der statischen Relaxationsfaktoren ([11]) einzuhalten, muss der berechnete Relaxationsfaktor statisch auf diese begrenzt werden. Die berechneten Relaxationsfaktoren stehen somit nicht mehr unmittelbar im Verhältnis zueinander. Hierdurch werden Inkonsistenzen in den übergebenen Werten erzeugt, die destabilisierenden Einfluss auf die Berechnung haben können.

Extrapolationsverfahren werden unter anderem auch als eigenständiges Kopplungsschema interpretiert. Die Bezeichnung ist dann die sogenannte Vektorextrapolation (vgl. [21]).

Das Verfahren benötigt, ebenso wie die Relaxationsverfahren, nur geringe Ressourcen. Die angewendete Extrapolationsmethode muss problemstellungsabhängig ausgewählt werden, um die Generierung zusätzlicher Instabilität zu vermeiden und die Konvergenzeigenschaften positiv beeinflussen zu können. Dies erfordert neben der Kenntnis des Konvergenzverhaltens der Problemstellung zusätzlich Kenntnisse der einzelnen Extrapolationsverfahren und Bedingungen an die Linearität der gekoppelt zu berechnenden physikalischen Felder.

Monolithischer Aufbau durch Ersatzmodelle

Durch geeignete Annahmen ist es möglich, aus den übergebenen Ergebnisvektoren u_x sowie u_y (vgl. Formel 2.2 sowie 2.3, S.8) jeweils ein Modell reduzierter Ordnung (ROM) nach einigen gerechneten Kopplungsiterationen zu berechnen. Wie in [52] und [53] vorgestellt, kann aus den berechneten ROMs ein monolithisches Gleichungssystem aufgestellt werden. Dessen Lösung wird als bessere Näherung an das gesuchte Ergebnis der Problemstellung angenommen als die bisher durch das grundlegende Iterationsverfahren erreichte. Sie kann im grundlegenden Iterationsverfahren als verbesserter Startwert zur weiteren Berechnung herangezogen werden.

Die Untersuchungen in z.B. [52], [53], [12], [13] zeigen deutliche Effizienzgewinne durch Einsatz des Verfahrens. Das resultierende Verfahren kann, insofern die ROMs partitioniert gekoppelt werden, als Modifikation des zugrunde gelegten Fixpunkt-Iterationsverfahrens zum Quasi-Newton Verfahren interpretiert werden ([21], [20]). Im Gegensatz zu den Newton-Verfahren ([16]) werden keine Jacobi-Matrizen aus den eingebundenen Programmen benötigt. Die Jacobi Matrizen werden durch das verwendete finite-Differenzen-Verfahren angenähert ([23], [31], [32]). Hierdurch kann weiterhin mit den eingebundenen Standard-Berechnungsprogrammen gearbeitet werden. Die Konvergenzvorteile des Newton-Verfahrens im Vergleich zu den Fixpunktiterationsverfahren gehen dabei jedoch teilweise verloren([16], [51], [22]).

Die angenäherte Jacobi-Matrix kann ebenfalls dazu verwendet werden, einen Relaxationsfaktor mithilfe der Methode des steilsten Abstiegs (vgl. [34], [40]) dynamisch zu bestimmen, ohne zeitaufwändige zusätzliche Berechnungsprogrammausführungen zu erfordern. Diese Methode wurde z.B. in [26] untersucht. Die Effizienz des Verfahrens er-

weist sich darin als geringer als die der Extrapolationsverfahren bzw. der dynamischen Relaxation nach dem Aitken Δ^2 -Verfahren.

Das Verfahren birgt bei großen Kopplungsschnittstellen hinsichtlich der gekoppelten Ergebnisgrößen zwischen den Einzelproblemstellungen hohen Ressourcenbedarf. Mit einer direkten Implementierung und Abspeicherung der Systemmatrix der monolithischen Berechnung, muss eine Matrix M mit

$$\Lambda(M) = (\Lambda(u_x) + \Lambda(u_y))^2$$

Einträgen vorgehalten werden. Hierin steht Λ für einen Operator, der die Anzahl der Einträge einer Matrix zurück gibt. Bei Fließkommazahlen doppelter Genauigkeit mit einem Speicherbedarf von 8 Byte pro Eintrag liegt der Speicherbedarf bereits bei einer Anzahl gekoppelter Ergebnisgrößen mit $\Lambda(u_x) = \Lambda(u_y) = 40\,000$ bei 51,2 GB. M ist dabei nichtsymmetrisch und vollbesetzt. Eine Verringerung des Speicherbedarfs kann durch entsprechende, auf Einzelvektorberechnung basierende Lösungsverfahren linearer Gleichungssysteme wie dem GMRES-Verfahren ([42], [54], [58]) erreicht werden. Dies erhöht im Allgemeinen den benötigten Rechenbedarf.

Das Verfahren erfordert keine Kenntnis der Problemstellung. Bei einer großen Anzahl an gekoppelten Ergebnisgrößen benötigt das Verfahren hohe Rechenleistung bzw. Speicherplatzressourcen. Unter Umständen hebt der Rechenzeit- bzw. Speicherplatzbedarf des Stabilisierungsverfahrens dessen Effizienzgewinn auf. Bei schlechter Kondition des monolithischen Gleichungssystems steigt im Allgemeinen die Anzahl der benötigten Lösungsiterationen des verwendeten Gleichungslösungsverfahrens an.

In kopplungsbedingt ausgeprägt schlecht konditionierten gekoppelten Problemstellungen kann das Verfahren zum Teil die Berechnung zu konvergentem Verhalten führen und somit die Bestimmung eines Ergebnisses ermöglichen.

Verfahren mit notwendiger Modifikation der eingebundenen Programme oder der Berechnungsmodelle

Neben den in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellten Stabilisierungsverfahren, die keine Änderungen an den eingebundenen Berechnungsprogrammen oder den Berechnungsmodellen erfordern, existieren auch Methoden, die für spezielle Problemstellungen effektiv sind, jedoch nicht ohne solche Modifikationen arbeiten können. Exemplarisch werden hier die Ansätze der Mehrgitterverfahren sowie der künstlichen Kompressibilität vorgestellt.

Ein ähnliches Prinzip wie bei der Generierung von Modellen reduzierter Ordnung wird bei den Mehrgittermethoden verwendet ([44]). Hierfür werden unterschiedlich fein diskretisierte Modelle in den eingebundenen Berechnungsprogrammen sowie eine Methode zum Übertrag der Ergebnisse zwischen diesen benötigt. Analog zu den Mehrgitterverfahren zur Lösung von Gleichungssystemen in der numerischen Mathematik werden zunächst Näherungslösungen der gekoppelten Problemstellung auf den grob diskretisierten Modellen berechnet. Die Ergebnisse werden auf das fein diskretisierte Modell übertragen und dort eine genauere Lösung berechnet. Da sowohl die groben, als auch die fein diskretisierten Modelle innerhalb der eingebundenen Berechnungsprogramme und damit partitioniert gelöst werden, findet lediglich eine mögliche Verkürzung der Rechenzeit durch die vorgelagerte Errechnung des Ergebnisses auf Modellen mit einer geringeren Anzahl an Freiheitsgraden statt. Eine eigentliche Stabilisierung schlecht konditionierter Problemstellungen wird in der Grundversion nicht vorgenommen. Die Mehrgittermethoden lassen sich mit anderen Verfahren kombinieren. So können z.B. auf den grob diskretisierten Modellen und damit kleinen Gleichungssystemen mit geringerem Aufwand mehrere Berechnungen durchgeführt werden, um z.B. über finite Differenzen die Jacobi-Matrizen der gekoppelten Gleichungssysteme anzunähern und mit diesen das Quasi-Newton Verfahren durchführen zu können.

Eine Stabilisierungsmethode für schlecht konditionierte Fluid-Struktur-Interaktionsberechnungen stellt die sogenannte künstliche Kompressibilität dar. Ist das Fluid als inkompressibel modelliert, bzw. ist dessen Kompressibilität gering, treten in der partitionierten Simulation ggf. numerisch hervorgerufene, starke Druckschwankungen in der Fluidberechnung, auf (vgl. [21]). Diese führen zu schlechten Konvergenzeigenschaften oder zu Divergenz der Berechnung. Durch Hinzufügen künstlicher Kompressibilität in

der Fluidberechnung können diese Druckschwankungen verringert werden. Die hinzugefügte Kompressibilität wird dabei proportional zum globalen oder lokalen Fehler der Berechnung heruntergefahren, sodass diese bei Erreichen des Ergebnisses verschwindet. In [39] wird das Verfahren aus den in [7] und [41] vorgestellten Methoden zur Konvergenzverbesserung bei Lösung der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen abgeleitet. In den in [39] durchgeführten Untersuchungen führt die Methodik bei der verwendeten, schlecht konditionierten Testproblemstellung zu konvergentem Verhalten.

2.3 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden grundlegende Konzepte zur partitionierten Multiphysiksimulation sowie deren Stabilisierung vorgestellt. Aus den Eigenschaften der Konzepte ergeben sich für das hier entwickelte Stabilisierungsverfahren für partitionierte, eng gekoppelte, programmexterne Multiphysiksimulationen, in denen Black-Box-Berechnungsprogramme eingebunden werden, mehrere Randbedingungen. Diese gelten auch für das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Kopplungsprogramm, das im Anhang dieser Arbeit ab Seite 110 beschrieben ist. Der partitionierte Ansatz der mathematischen Modellierung führt bei verstärkter Interaktion zwischen den gekoppelten Gleichungssystemen bzw. Berechnungsprogrammen zu einer erhöhten Anzahl benötigter Kopplungsiterationen. Gerade in diesen Fällen ist eine signifikante Verbesserung der Berechnungseigenschaften notwendig. Durch die Einbindung von Black-Box-Programmen in der gekoppelten Berechnung sind Rückschlüsse auf und Eingriffsmöglichkeiten in den Berechnungsprozess lediglich durch die übergebenen Ergebnisvektoren möglich. Die gekoppelten physikalischen Felder, die Eigenschaften der sie beschreibenden Gleichungen sowie die eingebundenen Berechnungsprogramme sind im Voraus nicht bekannt. Daher müssen Informationen über und Eingriffe in den Berechnungsablauf während dessen Laufzeit berechnet werden. Einstellungen des Benutzers dürfen zur Fehlervermeidung nicht notwendig sein. Programmexterne Multiphysiksimulationskonzepte werden speziell aufgrund der prinzipiell beliebigen Erweiterbarkeit auf unterschiedliche Kombinationen von zu lösenden Problemstellungen eingesetzt. Daher dürfen die Grundannahmen für die in dieser Arbeit entwickelte Methodik zur Stabilisierung und Beschleunigung partitionierter Multiphysiksimulationen um

dessen generelle Einsetzbarkeit zu gewährleisten, die Art der behandelbaren gekoppelten Problemstellungen nicht einschränken. Um auch in der Modellgröße keine unnötige Einschränkung darzustellen, muss der Ressourcenbedarf an Rechenzeit und Speicherplatz des Stabilisierungsverfahrens möglichst gering sein. Es dürfen keine über die ohnehin für die Kopplung notwendigen Anforderungen hinausgehende Anforderungen an die eingebundenen Berechnungsprogramme gestellt werden. Anpassungen an den Modellen sollen nicht notwendig sein.

3 Charakterisierung gekoppelter Berechnungsprozesse

Algorithmen werden im Allgemeinen auf einen speziellen Einsatzzweck sowie ein spezielles Gebiet hin entwickelt. Innerhalb dieses optimalen Anwendungsbereichs eines Algorithmus kann durch dessen korrekte Parametrisierung ein zusätzlicher Effizienzgewinn erreicht werden. Sowohl Auswahl als auch Parametrisierung bedürfen dabei Informationen über die zu behandelnde Problemstellung. Dieser Abschnitt stellt die Charakterisierung gekoppelter Berechnungen anhand der im gekoppelten Prozess zur Verfügung stehenden Informationen vor.

3.1 Verfügbare Informationen

Die Untersuchungen dieser Arbeit basieren auf der Kopplung von Black-Box-Programmen nach der Methodik der Fixpunktiterationsverfahren. Darin werden Berechnungsergebnisse zwischen den gekoppelten Programmen ausgetauscht.

Dem Kopplungsprogramm und damit den in Kapitel 4 (S. 46) entwickelten Stabilisierungsalgorithmen, stehen dabei folgende Werte zur Verfügung:

- Element- oder Knotenergebnisse aus den Berechnungsprogrammen pro Berechnungsaufruf
- Anzahl der ausgeführten Kopplungsiterationen
- Analysetyp (statisch oder transient)
- Berechnungsdauer und Zeitschrittweite der Kopplung (im transienten Fall)

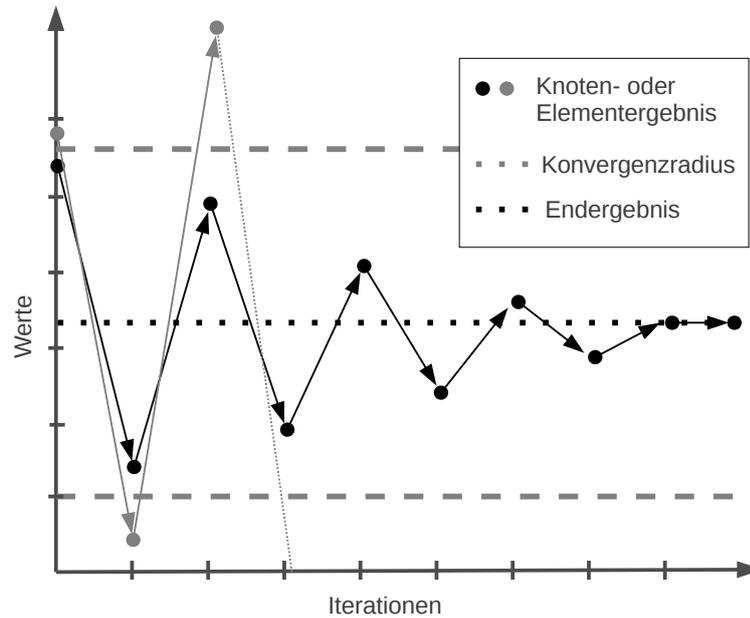


Abbildung 3.1: Alternierend konvergenter (schwarz dargestellt) und divergenter (grau dargestellt) Ergebnisverlauf einer gekoppelten Berechnung.

Aus diesen Informationen müssen unter den vorgegebenen Bedingungen die notwendigen Informationen für Eingriffe in den Berechnungsablauf errechnet werden.

3.2 Ableitbare Informationen

3.2.1 Ergebnisverlauf

Während gekoppelter Berechnungen werden Ergebnisse zwischen den im Prozess eingebundenen Berechnungsprogrammen übergeben. In jeder Iteration steht entsprechend ein Ergebnisvektor zur Verfügung, aus dem ein kopplungsgrößenspezifischer, wie z.B. element- oder knotenspezifischer, Ergebnisverlauf zusammengesetzt werden kann. Unterschieden werden können zwei grundlegende Arten von Verläufen. In den Abbildungen 3.1 sowie 3.2 sind diese exemplarisch dargestellt. In beiden Abbildungen ist jeweils der Verlauf eines Elementes des Ergebnisvektors über den Iterationen der gekoppelten Berechnung abgebildet.

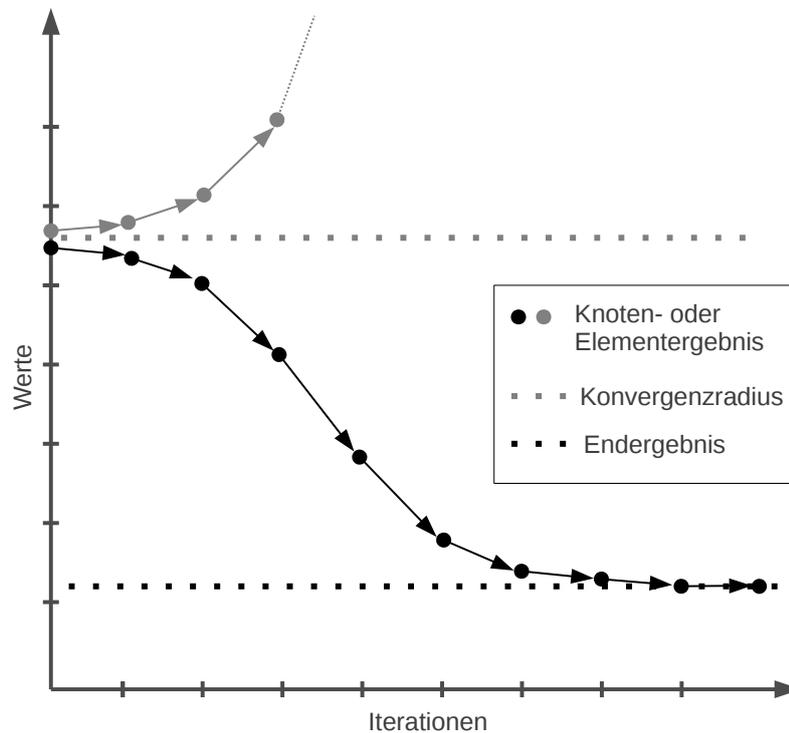


Abbildung 3.2: Schematisch dargestellter asymptotisch konvergenter (schwarz dargestellt) und divergenter (grau dargestellt) Werteverlauf.

Der Wert, der direkt auf der Ordinate der Diagramme liegt, entspricht einem vom Anwender vorgegebenen Startwert für die gekoppelte Berechnung. Von diesem aus nähert sich der Ergebnisverlauf dem Endergebnis im konvergenten Fall (in schwarz dargestellt) zunehmend an. Im divergenten Fall (in grau dargestellt) entfernen sich die Ergebnisse zunehmend von dem angestrebten Endergebnis. In Abbildung 3.1 ist ein alternierender bzw. oszillierender Verlauf dargestellt, bei dem die Ergebniswerte abwechselnd über und unter dem Endergebnis liegen. In Abbildung 3.2 ist ein Beispiel asymptotischer Ergebnisverläufe dargestellt. In diesem nähern sich die Werte sukzessive streng monoton fallend oder steigend dem Endergebnis an oder entfernen sich von diesem.

Die dargestellten divergenten und konvergenten Fälle werden durch die unterschiedliche Lage der Startwerte hervorgerufen. Das betrachtete Gauß-Seidel-Schema zur Kopplung der Berechnungsprogramme gehört zu den Fixpunktiterationsverfahren. Sofern es sich nicht um einen abstoßenden Fixpunkt handelt, bei dem kein Ergebnis berechnet werden kann, sind diese Verfahren im Allgemeinen lediglich lokal konvergent.

Dies bedeutet, dass der vorgegebene Startwert innerhalb eines Bereichs um das Endergebnis liegen muss, damit die Berechnung zum angestrebten Fixpunkt konvergiert. Dieser Bereich wird als Konvergenzradius bezeichnet und ist problemstellungsabhängig. In den beiden genannten Abbildungen ist dieser als graue, gestrichelte horizontale Linie dargestellt.

3.2.2 Verlauf des lokalen Fehlers

Aus dem Ergebnisverlauf lässt sich der lokale Fehler der Berechnung bestimmen. Die Errechnung geschieht durch die Differenzenbildung von jeweils zwei, in aufeinanderfolgenden Iterationen errechneten Ergebnissen. Die Berechnung lässt sich darstellen als

$$e_{\text{lokal}} = x_i - x_{i-1} \quad (3.1)$$

Aus e_{lokal} kann abgeleitet werden, ob es sich bei konkreten Berechnungen um konvergentes oder divergentes Verhalten handelt. Wie in den Abbildungen 3.1 sowie 3.2 erkennbar ist, nimmt der Betrag des lokalen Fehlers bei konvergentem Verhalten über die Iterationen ab. Bei divergentem Verhalten nimmt dieser zu. Bei Erreichen des Endergebnisses verschwindet der lokale Fehler, da sich die Systeme miteinander im Gleichgewicht befinden. Das Durchführen weiterer Iterationen führt nicht mehr zu einer Veränderung der übergebenen Ergebnisse.

In gekoppelten Berechnungen kann im Gegensatz zu ähnlichen Lösungsverfahren von linearen Gleichungssystemen nur bedingt auf den globalen Fehler sowie eine Näherung für das Endergebnis der Berechnung geschlossen werden. Nichtlineare Einflüsse in den gekoppelt berechneten Einzelproblemstellungen verändern den Verlauf des lokalen Fehlers und führen zu unverlässlichen Ergebnissen für den abgeschätzten globalen Fehler. Diese sind innerhalb der Black-Box Programme bekannt. Das Kopplungsprogramm kann entsprechende Einflüsse nicht berücksichtigen.

3.2.3 Abschätzung der Kondition

Die vom Benutzer vorgegebenen Startwerte der gekoppelten Berechnung bzw. die während der Berechnung von den eingebundenen Programmen errechneten Ergebnisse lassen sich als additive Überlagerung von zu berechnender Lösung und einer Störung unbekannter Größe deuten. Problemstellungsspezifisch hat die Störung in den Werten unterschiedlich starken Einfluss auf den Verlauf der Berechnung. Die Kondition der gekoppelten Problemstellung bezeichnet die Quantifizierung des Einflusses des genannten Fehleroffsets auf den Verlauf der Berechnung. Die Kenntnis der Kondition ermöglicht eine Abschätzung inwieweit und in welcher Höhe Eingriffe zum Erreichen von Konvergenz möglich und nötig sind. Die Kondition der gekoppelten Problemstellung setzt sich aus den Faktoren

- Kondition der Einzelgleichungssysteme
- Stabilität der verwendeten Lösungsalgorithmen für die Einzelgleichungssysteme
- Stärke der Feldinteraktionen

zusammen. Ausgehend von eingebundenen Berechnungsprogrammen mit stabilen Lösungsalgorithmen sowie ausreichender Kondition der Einzelproblemstellungen besitzt der letztgenannte Aspekt dominanten Einfluss. Dies ist die Ursache des in Abschnitt 2.1.1 genannten Nachteils partitionierter Verfahren bei gekoppelten Problemstellungen mit starken Wechselwirkungen zwischen den betrachteten physikalischen Feldern. In diesem Fall bewirken vergleichsweise geringe Störungen in den Startwerten große Auswirkungen auf den gekoppelten Prozess.

Zur Bewertung der Kondition wird ein Verfahren benötigt, das ausschließlich auf den Werten, die für das Kopplungsprogramm verfügbar sind, arbeitet. Darüberhinaus sollen Informationen über die Kondition bereits nach wenigen Kopplungsiterationen zur Verfügung stehen.

Sobald der lokale Fehler der Iterationen verschwindet, kann, wie im obigen Abschnitt genannt, auf gleichzeitiges Verschwinden des globalen Fehlers geschlossen werden. Die gekoppelt berechneten Einzelproblemstellungen stehen miteinander im Gleichgewicht. Nimmt die Differenz zweier, aufeinander folgend errechneter Ergebnisse ab, weist dies entsprechend auf eine konvergierende Berechnung hin. Nimmt diese zu, deutet dies auf

eine divergierende Berechnung hin. Das gewünschte Verhalten einer Berechnung ist ein schnelles Abklingen des lokalen Fehlers. Die Abklinggeschwindigkeit, und damit das Verhältnis aufeinander folgend berechneter lokaler Fehler, lässt Rückschlüsse auf die Kondition einer vorliegenden Problemstellung zu. Es lässt sich eine Konditions Kennzahl K definieren, die auf dieser Grundlage aufbaut und in Anlehnung an Abbildung 2.6 aus Abschnitt 2.2 (S.25) den Wert von $|\frac{dF(x)}{dx}|$ linearisiert annähert. Die Berechnungsvorschrift lässt sich angeben als

$$K = \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i-1} - x_{i-2}}. \quad (3.2)$$

x steht für ein Element- oder Knotenergebnis. i ist der Zähler über die Kopplungsiterationen.

K lässt sich nach Gleichung 3.2 bereits ab drei verfügbaren Werten errechnen und steht somit bereits in frühen Berechnungsstadien zur Verfügung.

K kann analog zu $|\frac{dF(x)}{dx}|$ (vgl. Abbildung 2.6, S.25) Werte zwischen $-\infty$ und $+\infty$ annehmen. Relevant ist die Unterscheidung

$$K = \begin{cases} a) & K < -1 & \text{im Fall alternierender Divergenz} \\ b) & -1 < K < 0 & \text{im Fall alternierender Konvergenz} \\ c) & 0 < K < 1 & \text{im Fall asymptotischer Konvergenz} \\ d) & K > 1 & \text{im Fall asymptotischer Divergenz oder Konvergenz} \end{cases}$$

Die Fälle a) und b) sind in Abbildung 3.1 dargestellt, die Fälle c) und d) in Abbildung 3.2. Dabei muss beachtet werden, dass sich im Fall d) keine Aussage über Divergenz oder Konvergenz der Berechnung treffen lässt. Wie in der entsprechenden Abbildung dargestellt, können auch in konvergierenden Berechnungen die Differenzen aufeinanderfolgend errechneter Element- oder Knotenergebnisse zunächst ansteigen.

Die Kondition der gekoppelten Problemstellung lässt sich innerhalb der aufgezählten Bereiche präzisiert abschätzen.

- $1 \gg |K| > 0 \quad \Rightarrow$ Schnelle Konvergenz, gute Kondition
- $1 > |K| \gg 0 \quad \Rightarrow$ Langsame Konvergenz, ausreichende Kondition
- $\infty \gg |K| > 1 \quad \Rightarrow$ Langsame Divergenz, mangelhafte Kondition
- $\infty > |K| \gg 1 \quad \Rightarrow$ Schnelle Divergenz, schlechte Kondition

Anzumerken ist, dass im letzten Fall keine sichere Aussage zu Konvergenz oder Divergenz der Berechnung getroffen werden kann, sofern der Ergebnisverlauf asymptotisch ist. Sofern die Berechnung divergiert, lässt sich die Berechnung ausschließlich unter Einsatz von Stabilisierungsverfahren (Kapitel 4, S. 46 bzw. Abschnitt 2.2) erfolgreich durchführen. Weist die Berechnung konvergentes Verhalten auf, läuft die Berechnung auch ohne Einsatz solcher Verfahren erfolgreich ab. Allerdings lässt sich in diesem Fall durch den Einsatz von Stabilisierungsverfahren $i_{Konvergenz}$ verringern.

4 Stabilisierung und Beschleunigung eng gekoppelter Prozesse

In diesem Kapitel werden das Prinzip sowie daraus resultierende Algorithmen eines adaptiven Stabilisierungsverfahrens für den gekoppelten Berechnungsprozess entwickelt. Hierzu wird zunächst ein bekanntes Stabilisierungsverfahren als Grundlage ausgewählt. Daraufhin wird aus der klassischen Schwingungslehre ein Prinzip zur Erweiterung des als Grundlage gewählten Verfahrens abgeleitet. Abschließend werden unterschiedliche Ansatzfunktionen zur Umsetzung des Prinzips aufgestellt und in drei Algorithmen umgesetzt.

4.1 Auswahl eines Verfahrens als Grundlage der adaptiven Stabilisierung

Zur Entwicklung eines Stabilisierungsverfahrens, das unabhängig von

- der Art der gekoppelten Gleichungssysteme bzw. Berechnungsprogramme
- der Anzahl der gekoppelten Ergebniswerte zwischen den gekoppelten Berechnungen
- Einstellungen und damit Kenntnissen des Anwenders

eingesetzt werden kann, wird ein bestehendes Stabilisierungsverfahren erweitert. In Abschnitt 2.2 (S.24 ff.) wurden ausgewählte Verfahren vorgestellt.

Der Aufbau von Ersatzmodellen reduzierter Ordnung bietet gute konvergenzverbessernde Eigenschaften. Die behandelbare Anzahl gekoppelter Ergebniswerte ist durch den benötigten Speicherplatzbedarf jedoch eingeschränkt.

Extrapolationsverfahren können die Konvergenzeigenschaften ebenfalls stark positiv beeinflussen. Die benötigten Ressourcen schränken die behandelbare Anzahl an gekoppelter Ergebniswerte nicht ein. Die Verfahren basieren auf grundlegenden Annahmen zum Konvergenzverlauf der gekoppelten Problemstellung. Weicht eine Problemstellung von diesen Annahmen ab, können Extrapolationsverfahren das Konvergenzverhalten verschlechtern und zu Divergenz der Berechnung führen. Die Auswahl eines für eine Problemstellung geeigneten Verfahrens ist im Regelfall schwierig.

Aufgrund dieser Eigenschaften von Extrapolationsverfahren und den Verfahren basierend auf Modellen reduzierter Ordnung wird als Basis für den im folgenden Abschnitt entwickelten Stabilisierungsalgorithmus das statische Relaxationsverfahren gewählt. Es benötigt nur geringe Hardwareressourcen. Die Einstellung geeigneter Relaxationsparameter für eine konkrete gekoppelte Berechnung stellt bei diesem Verfahren das zentrale Problem in der Anwendung dar. Die Aufgabenstellung der folgenden Abschnitte ist daher die Entwicklung einer Methodik zur Bestimmung der geeigneten Relaxationsparameter.

4.2 Herleitung des adaptiven Relaxationsverfahrens

In diesem Abschnitt wird zunächst die Ableitung einer grundlegenden Methodik sowie das daraus entwickelte Prinzip des adaptiven Relaxationsverfahrens sowie Parametergrenzen vorgestellt.

4.2.1 Transfer von Erkenntnissen der klassischen Schwingungslehre auf gekoppelte Berechnungsprozesse

Die Grundidee des entwickelten Prinzips basiert auf der Interpretation der gekoppelten Berechnung als schwingfähiges System mit systemimmanenten Dämpfungseigenschaften.

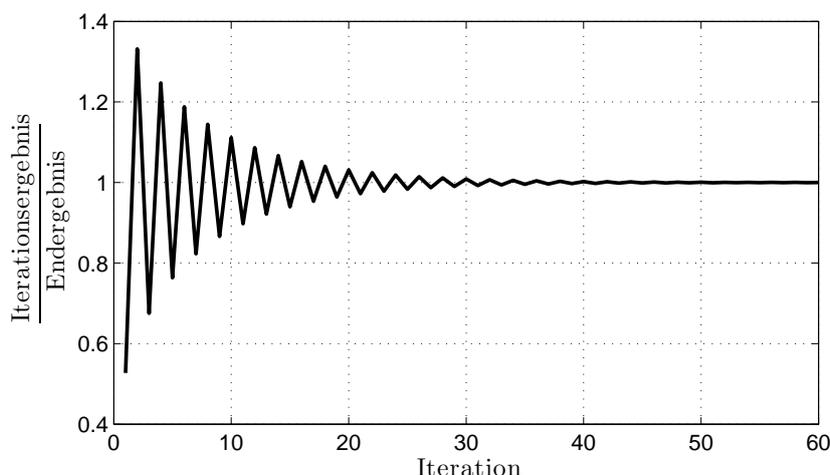


Abbildung 4.1: Normierter Ergebnisverlauf des Modells "FSI mit senkrechter Initialposition" aus Kapitel 5 für eine ausgewählte Parametrisierung.

Die vom Nutzer oder durch vorangegangene Berechnungen vorgegebenen Startwerte der Berechnung sind im Allgemeinen fehlerbehaftet. Sie lassen sich als die mit einem unbekanntem Fehler beaufschlagte korrekte Lösung des Problems ansehen. In dieser Interpretation wird das schwingfähige System durch diese unbekannte Fehlerfunktion aus dem, den Ruhezustand darstellenden, Endergebnis ausgelenkt. Aus diesem ausgelenkten Zustand wird das System als freier Schwinger bei Beginn der iterativen gekoppelten Berechnung losgelassen.

Der elementspezifische Ergebnisverlauf, der während der Berechnungsiterationen entsteht (vgl. Abschnitt 3.2.1, S. 40) ist exemplarisch in den Abbildungen 4.1 sowie 4.2 dargestellt. Zu erkennen ist in Abbildung 4.1 ein alternierender Ergebnisverlauf, welcher dem Verhalten eines unterkritisch gedämpften Systems entspricht. Im Gegensatz hierzu kann bei Betrachtung von Abbildung 4.2 durch den asymptotischen Ergebnisverlauf auf überkritische systemimmanente Dämpfungseigenschaften geschlossen werden. Die nicht dargestellten Werteverläufe mit zunehmender Schwingungsamplitude instabiler gekoppelter Berechnungen entsprechen einer negativen systemimmanenten Dämpfung.

Ziel der Stabilisierungsmethodik ist es, eine möglichst kurze Abklingdauer der Schwingung zu erzeugen. Dies ist analog zu obiger Darstellung gleichzusetzen mit der schnellstmöglichen Reduktion des Anfangsfehlers. Entsprechend der klassischen Schwingungslehre führt genau der Übergang von über- zu unterkritisch gedämpften Schwingungsverhalten, der aperiodische Grenzfall, zu dem gewünschten Verhalten.

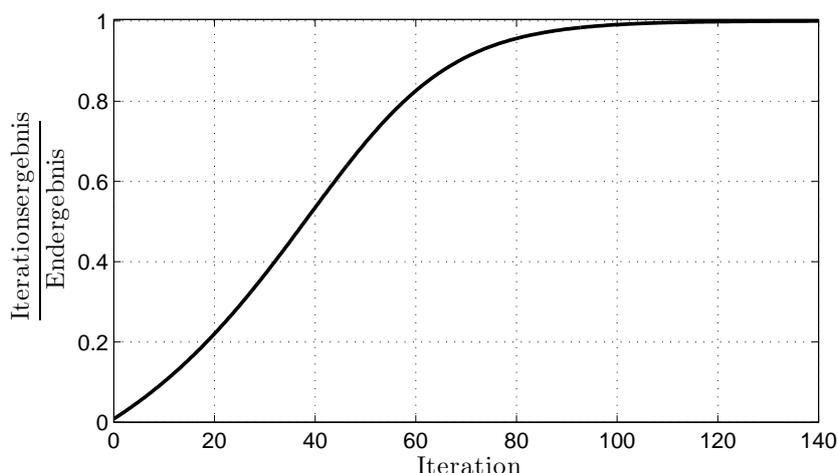


Abbildung 4.2: Normierter Ergebnisverlauf des Modells "FSI mit waagrecht Initialposition" aus Kapitel 5 für eine ausgewählte Parametrisierung.

Um diesen aperiodischen Grenzfall in einer konkreten gekoppelten Berechnung herbeizuführen, muss die dort existente systemimmanente Dämpfung problemspezifisch erhöht oder abgesenkt werden.

Notwendig ist dafür zunächst die Feststellung der vorherrschenden Systemeigenschaften. Darauf aufbauend müssen Eingriffe in den Berechnungsablauf erfolgen um dessen Abklingverhalten möglichst nahe an den aperiodischen Grenzfall heranzuführen.

4.2.2 Prinzip zur adaptiven Relaxationsparameterbestimmung

Wie im vorangegangenen Abschnitt aufgezeigt, werden zunächst Informationen über das Systemverhalten der gekoppelten Berechnung benötigt. Zur Extraktion der Informationen wird eine Analysefunktion für den gekoppelten Prozess benötigt.

Um belastbare Informationen zum gekoppelten Prozess zu generieren, müsste die Analysefunktion auf einer hohen Anzahl von iterativ berechneten Ergebnissen der Modelle arbeiten. Dies würde frühzeitige Aussagen über das Verhalten einer gekoppelten Berechnung verhindern. Ohnehin schnell konvergierende Berechnungen könnten nicht durch stabilisierende Eingriffe verkürzt werden. In Berechnungen mit schlechtem Konvergenzverhalten könnte eine bis zu diesem Zeitpunkt bereits eingetretene Divergenz nicht mehr korrigiert werden. Arbeitet die Analysefunktion auf Ergebniswerten von nur wenigen

Iterationen, kann keine exakte Aussage zur vorhandenen systemimmanenten Dämpfung getroffen werden.

Ohne somit direkt auf den optimalen Relaxationsparameter schließen zu können, ist jedoch die generelle Aussage möglich, dass bei alternierendem Ergebnisverlauf die systemimmanente Dämpfung unterhalb derjenigen des aperiodischen Grenzfalls liegt. Für asymptotische Werteverläufe verhält sich dies umgekehrt.

Die entsprechend benötigte berechnungsspezifische Information wird durch den in Abschnitt 3.2.3 (Seite 43) entwickelten Kennwert K bereits bei drei vorhandenen Iterationsergebnissen bereitgestellt und ist somit in frühen Berechnungsstadien verfügbar. Angelehnt an Abbildung 2.6 (S.25) entspricht dieser einer linearisierten Abschätzung von $|\frac{dF(x)}{dx}|$.

Auf Basis des Kennwertes K muss der Algorithmus adaptiv dem System der gekoppelten Berechnung zusätzliche Dämpfung hinzufügen oder entziehen. Im nichtadaptiven Fall entspricht diese künstliche Dämpfung dem in Abschnitt 2.2.4 ab Seite 29 vorgestellten statischen Relaxationsverfahren. Der dort verwendete Parameter ω aus Gleichung 2.7 (S.29) muss entsprechend des Wertes von K im angestrebten adaptiven Fall angepasst werden, um das Verhalten der Berechnung möglichst nahe an den aperiodischen Grenzfall heranzuführen und somit die Kondition der gekoppelten Problemstellung zu verbessern. Dies entspricht aus mathematischer Sicht einer möglichst starken Reduzierung von $|\frac{dF(x)}{dx}|$ aus Abschnitt 2.2 (S. 24).

Die prinzipielle Berechnungsvorschrift des entwickelten Algorithmus ist dementsprechend unter Berücksichtigung der erhöhten Dämpfung bei abgesenktem ω sowie der abgesenkten Dämpfung bei erhöhtem ω

$$\omega_i = \omega_{i-1} + \Delta\omega_i \tag{4.1}$$

mit

$$\Delta\omega_i < 0 \text{ für } K \leq 0$$

und

$$\Delta\omega_i > 0 \text{ für } K \geq 0$$

Vom Algorithmus adaptiv zu bestimmen ist das veränderliche Inkrement $\Delta\omega_i$, dessen Berechnungsvorschrift entscheidenden Einfluss auf die Effektivität der Stabilisierung bzw. Beschleunigung hat.

Für die Bildung einer grundlegenden Berechnungsvorschrift für diese Operationen ist zunächst zu klären, welche Einflüsse berücksichtigt werden müssen.

Nach [11], S. 562 f. (vgl. Abschnitt 2.2.4) muss für den zu wählenden Parameter

$$\omega \in]0, 2[\quad (4.2)$$

weiterhin auch im adaptiven Fall gelten um weder eine Stagnation noch eine Destabilisierung der Berechnung zu erzeugen. Mit Γ_u als unterer und Γ_o als oberer zulässiger Grenze für ω nach Bedingung 4.2, führt dies zu der Bedingung

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{i \max} &\stackrel{!}{\leq} \Gamma_o - \omega_{i-1} \quad \text{für } K \geq 0 \\ \Delta\omega_{i \min} &\stackrel{!}{\geq} \Gamma_u - \omega_{i-1} \quad \text{für } K \leq 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

für den maximal einsetzbaren Wert für $\Delta\omega_i$. Dieser soll symmetrisch stets durch den Abstand zu der näher liegenden Bereichsgrenze bestimmt werden. Hierdurch werden Veränderungen des Relaxationsparameters in der Nähe der Randbereiche, in denen eine Veränderung von ω am stärksten den Berechnungsablauf beeinflusst, beschränkt. Dies führt zu einer höheren Stabilität in diesen Bereichen bei gleichzeitig erhalten bleibender Adaptionsfähigkeit des Algorithmus im Bereich um $\omega_{i-1} \approx 1$. Das Vorzeichen der Anpassung des Relaxationsparameters ist gleich dem des Kennwertes K , der für unterkritische systemimmanente Dämpfung negativ, für überkritische positiv wird.

Weiterhin muss berücksichtigt werden, ob die Systemeigenschaften auf eine nahezu optimale systemimmanente Dämpfung schließen lassen ($|K| \approx 0$) oder ob diese vergleichsweise weit von dieser entfernt liegen. Im ersten Fall soll der Algorithmus die künstliche Dämpfung bzw. Relaxation durch $\Delta\omega_i$ nur deutlich geringer verändern als im zweiten Fall. Dementsprechend muss neben der reinen ω_{i-1} -Abhängigkeit aus Bedingung 4.3 auch die Höhe von $|K|$ durch den Algorithmus beachtet werden.

Dies lässt sich darstellen als

$$\Delta\omega_i = \Omega(\omega_{i-1}, K). \quad (4.4)$$

Es gilt

$$\Omega(\omega_{i-1}, K) = \Omega^\omega(\omega_{i-1}) \cdot \Omega^K(K). \quad (4.5)$$

Hiermit ist die grundlegende Abhängigkeit beschrieben.

Darauf aufbauend ist es notwendig, Parametrisierungsmöglichkeiten für den später zu entwickelnden konkreten Algorithmus vorzuhalten.

Zunächst ist eine Skalierungsmöglichkeit für die Höhe des durch Ω^ω berechneten Anteils des Relaxationsparameterinkrements wünschenswert, um den Adaptionseinfluss regeln zu können. Zu starke adaptive Einflüsse können selbst die Berechnung destabilisieren. So läge z.B. im Fall einer direkten Implementierung als

$$\Delta\omega_{i\ u} = \Omega = \Delta\omega_{i\ min} \quad (4.6)$$

bzw.

$$\Delta\omega_{i\ o} = \Omega = \Delta\omega_{i\ max} \quad (4.7)$$

ω_i stets auf den Rändern Γ_u bzw. Γ_o .

Daher wird der Adaptionseinflussfaktor Φ eingeführt, der in die Berechnungsvorschrift von Ω^ω eingeht. Dieser darf lediglich verringernden Einfluss haben, um Bedingung 4.2 nicht zu verletzen und ist somit beschränkt auf

$$\Phi \in [0, 1]. \quad (4.8)$$

Um unterschiedlich starkes Gewicht auf stabilisierende ($\Delta\omega_i < 0$) und beschleunigende ($\Delta\omega_i > 0$) Operationen legen zu können, ist ein Asymmetriefaktor notwendig, über den der Abstand von oberer und unterer Grenze für ω_i vom neutralen Wert 1 unabhängig voneinander verringern zu können. Diese sind $\Xi_{u,o}$ für die Skalierung von $\Gamma_{u,o}$ aus Bedingung 4.3 mit

$$\Xi_{u,o} \in]0, 1]. \quad (4.9)$$

Die benötigten Faktoren für die Parametrisierung der ω_{i-1} -Abhängigkeit eines adaptiven Algorithmus Ω , Ω^ω sind hiermit spezifiziert.

Für die K -Abhängigkeit des Algorithmus Ω , Ω^K wird zunächst ebenfalls ein genereller Skalierungsfaktor analog zu Φ für die ω_{i-1} -Abhängigkeit benötigt. Dieser wird hier als κ eingeführt und skaliert den Einfluss von K . Für κ gilt:

$$\kappa \in]0, \infty[\quad . \quad (4.10)$$

Im Fall der Wahl einer nichtlinearen Ansatzfunktion kann gegebenenfalls auch deren

Form verändert werden. Hierzu wird ein optionaler Faktor κ_{slope} eingeführt. Dieser soll die Anfangssteigung der Ansatzfunktion im Bereich $K \approx 0$ verändern und somit das Verhalten des Algorithmus für kleine und große Werte von K unterschiedlich stark gewichten. Hiermit sind die benötigten Faktoren für die Parametrisierung der K -Abhängigkeit vollständig angegeben.

Mit diesen Parametern wäre im Bereich von $\omega_i \approx \omega_{opt}$ ein konstanter Wechsel von $\Delta\omega_i$ zwischen positiven und negativen Bereichen möglich. Um dieses als Schwingen des Algorithmus interpretierbare Verhalten weit möglichst zu verhindern, wird ein als eine Art künstliche Masse interpretierbarer Faktor benötigt. Dieser wird als μ eingeführt. Er wird in dieser Arbeit dermaßen konfiguriert, dass er im Fall eines Vorzeichenwechsels zwischen $\Delta\omega_{i-1}$ und $\Delta\omega_i$ den Adaptionseinfluss durch Skalierung von Ω aus der Grundgleichung 4.4 des Algorithmus verringert. Findet zwischen $\Delta\omega_{i-1}$ und $\Delta\omega_i$ kein Vorzeichenwechsel statt, wird Ω mit $1 + \frac{\mu}{2}$ hochskaliert, bis zum Erreichen des ursprünglich eingestellten Wertes. Hierdurch kann der Adaptionseinfluss bis nahe an seinen ursprünglichen Wert zurückkehren. Gleichzeitig wird durch die unterschiedliche Skalierung von Reduzierung und Verstärkung des Adaptionseinflusses eine Trägheit des Einflusses von μ erreicht. In Bereichen der Berechnung mit wechselnden K -Werten kann $\Delta\omega_i$ somit sehr sensibel verstellt werden, ohne dieses Verhalten auch in anderen Bereichen aufweisen zu müssen. Um μ lediglich verringernd einzuführen wird der zulässige Wertebereich als

$$\mu \in]0,1] \tag{4.11}$$

definiert.

Wie auch in den Algorithmen von Abschnitt 2.2.4 ist die Frage nach einer lokalen (element- bzw. knotenspezifischen) oder globalen Einstellung der Stabilisierungsverfahren gegeben. Hierzu müssen die positiven und negativen Eigenschaften einer lokalen Einstellung gegeneinander abgewogen werden.

Als positiv anzuführen ist, dass in unterschiedlichen Bereichen der Modelle auf unterschiedliche Konvergenzverhalten eingegangen werden kann. Ein globaler Faktor kann unter Umständen für einen Bereich optimal gewählt sein, in einem anderen Bereich die Berechnung jedoch verlangsamen oder destabilisieren. Ein Beispiel hierfür ist eine gekoppelt berechnete Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung, in der die Modelle aus Abschnitt 5.2.2 (S. 70 ff.) kombiniert in einem Modell berechnet werden. Asymptotisches sowie alternierendes Verhalten existieren parallel in unterschiedlichen Bereichen eines

einzigem Modells. Ein globaler konvergenzverbessernder Faktor ist nicht vorhanden. Bei lokaler Einstellung können die Faktoren entsprechend unterschiedlich gewählt werden. Dementgegen steht die Überlegung, inwiefern lokal unterschiedliche Relaxationsfaktoren die Einträge im übergebenen Ergebnisvektor benachbarter Punkte zu stark auseinander treiben und somit das Konvergenzverhalten selbst negativ beeinflussen können. Bei Anwendung eines lokal arbeitenden Extrapolationsverfahrens können selbst geringe Unterschiede in den Ergebnisverläufen zu starken Abweichungen in den extrapolierten Werten über dem Berechnungsgebiet führen. In diesen Verfahren wird im Regelfall das Ziel verfolgt, möglichst direkt aus den bisherigen Ergebnissen auf das Endergebnis der Berechnung zu schließen. Veränderungen der Ergebnisverläufe (vgl. Abschnitt 3.2.1, S. 40 ff.) durch nichtlineare Einflüsse können im Voraus nicht abgeschätzt werden und führen zu hohen Extrapolationsfehlern. Dem entgegen wird bei dem in dieser Arbeit entwickelten adaptiven Relaxationsverfahren nur in beschränkter Höhe Einfluss auf die Übergabewerte ausgeübt. Starke Gradienten der Stabilisierungsfunktion über den benachbarten Elementen der übergebenen Ergebnisvektoren sind dementsprechend nicht vorhanden. Hinzu kommt eine Eigenschaft prinzipiell aller derzeit eingesetzter Berechnungsmethoden zur Simulation einzelner physikalischer Felder. Unabhängig davon, ob die FEM, FVM, FDM oder auch z.B. MKS angewendet wird, ergeben sich über die Elemente, Knoten oder Auswertungspunkte nur geringe Wertesprünge. Unter anderem ist diese Eigenschaft in [53] beschrieben. Die Ergebnisse der Berechnungsprogramme sind ausschließlich mit niederfrequenten Fehlerfunktionen über dem Berechnungsgebiet beaufschlagt. Hochfrequente Fehler in den Input-Dateien werden durch die Feldberechnungsoperationen verhältnismäßig schnell geglättet. Demzufolge sind geringe, zusätzliche hochfrequente Fehlerfunktionen durch abweichende Fehler zwischen benachbarten Elementen, die durch den Einsatz eines lokal arbeitenden Stabilisierungsverfahrens erzeugt werden, unkritisch. Dementgegen werden niederfrequente Fehlerfunktionen bei gekoppelten Berechnungen ohne Einsatz von zusätzlichen Verfahren zur Stabilisierung und Beschleunigung langsam verringert. Diese müssen durch die Kopplungsiterationen geglättet werden, da sie in den Einzelmodellen ohne Berücksichtigung der Feldinteraktionen konsistente Lösungen darstellen können. Die durch den Einsatz lokaler Relaxationsfaktoren hervorgerufenen hochfrequenten Fehlerfunktionen sind demnach gegenüber dem Vorteil der schnelleren Reduktion niederfrequenter Fehlerfunktionen weniger stark zu gewichten. Daher wird das hier entwickelte Prinzip eines adaptiven Relaxationsverfahrens und damit ebenfalls die konkreten, daraus abgeleiteten Algorithmen lokal ausgelegt.

4.3 Adaptive Stabilisierungsalgorithmen

Basierend auf dem entwickelten Prinzip zur adaptiven Relaxation werden in diesem Abschnitt konkrete Ansatzfunktionen zur K - und ω_{i-1} -abhängigen Bestimmung optimaler Relaxationsparameter erarbeitet. Diese werden anschließend zu Algorithmen kombiniert.

4.3.1 Erarbeitung geeigneter Ansatzfunktionen

Auf Basis der Rahmenbedingungen der vorangegangenen Abschnitte werden für eine konkrete Realisierung eines adaptiven Relaxationsalgorithmus jeweils eine Ansatzfunktion für die Abhängigkeit des Algorithmus von ω_{i-1} , Ω^ω sowie von K , Ω^K benötigt. Für jede der beiden Funktionen wird eine lineare und eine nichtlineare Funktion entwickelt, um im nachfolgenden Kapitel die Auswirkungen, die deren Aufbau und Auswahl auf die Effektivität und Effizienz der prinzipiellen Funktionsweise der entwickelten adaptiven Relaxation hat, vergleichend gegenüberstellen zu können.

ω_{i-1} -abhängige Ansatzfunktionen

Als Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des Algorithmus Ω , Ω^ω , bietet sich die lineare Verbindung zwischen den Punkten $\Delta\omega_i = 0$ bei $\Gamma_{u,o}$ und $\Delta\omega_i \max$ bei $\omega_{i-1} = 1$ an. Diese lineare Ansatzfunktion ist in Abbildung 4.3 schematisch für eine beispielhafte Parametrisierung des Algorithmus dargestellt. Mit abnehmender Entfernung zu den Rändern des zulässigen Wertebereichs bzw. des um $\Xi_{u,o}$ skalierten zulässigen Wertebereich (vgl. Abschnitt 4.2.2) nimmt der Wert für $\Delta\omega_i$ entsprechend linear ab. Dieser Zusammenhang ergibt sich als lineare Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des Algorithmus, Ω_i^ω zu

$$\Omega_i^\omega = |\Gamma_{\Xi_{u,o}} - \omega_{i-1}|_{\min}. \quad (4.12)$$

Anstelle der linearen Ansatzfunktion kann auch eine nichtlineare Funktion verwendet

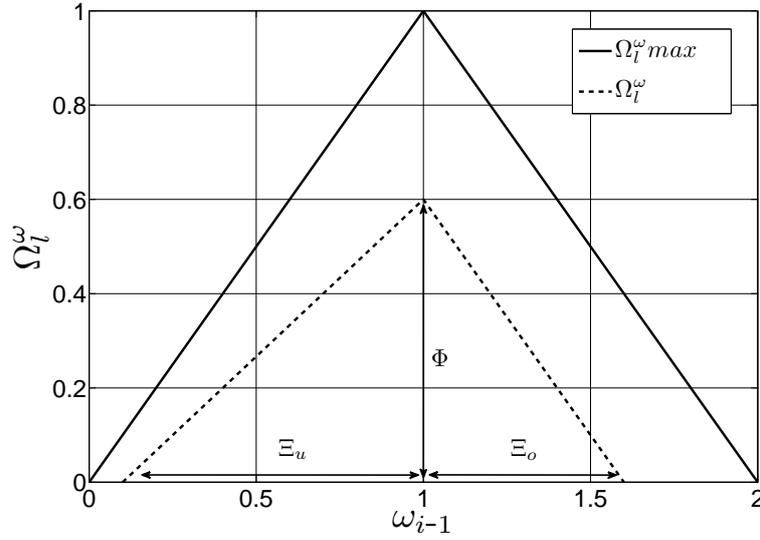


Abbildung 4.3: Linearen Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.

werden. Damit kann eine stärkere oder schwächere Veränderung zwischen ω_{i-1} und ω_i in unterschiedlichen ω_{i-1} -Bereichen erzielt werden. Hier wird eine trigonometrische Funktion gewählt. Mit dem Ziel, im Bereich um ω_{i-1} ein Gebiet nahezu konstanter Werte für Ω_{nl}^ω zu erreichen und in der Nähe von $\Gamma_{u,o}$ geringere Werte für $\Delta\omega_i$ zu erhalten, ist die hier ausgewählte Funktion eine den Anforderungen entsprechend parametrisierte und begrenzte Kosinus-Funktion. Der höchste Funktionswert muss bei $\omega_{i-1} = 1$ liegen. Nullstellen sollen sich bei $\Gamma_{u,o}$ befinden. Zusätzlich soll die Funktion Bedingung 4.3 für $\Phi = 1$ an keiner Stelle verletzen. Dementsprechend kann unter Berücksichtigung der definierten Parameter die nichtlineare Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit als

$$\Omega_{nl}^\omega = \frac{\cos((\omega_{i-1} - 1) \cdot \Pi) + 1}{2,5} \quad (4.13)$$

angegeben werden. Die entsprechende schematische Darstellung findet sich in Abbildung 4.4.

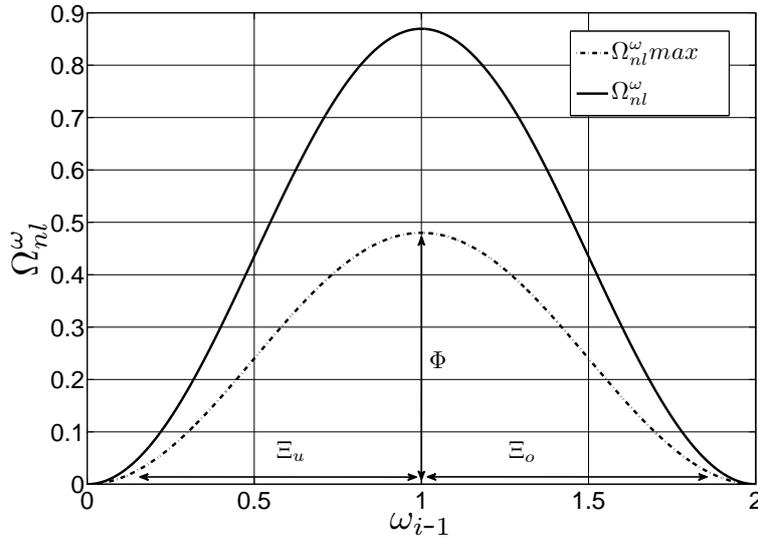


Abbildung 4.4: Nichtlineare Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.

K -abhängige Ansatzfunktionen

Analog zum vorherigen Abschnitt, können auch für die K -Abhängigkeit des Algorithmus, Ω^K , lineare und nichtlineare Ansatzfunktionen entwickelt werden. Eine lineare Ansatzfunktion mit entsprechender Skalierung des K -Einflusses ist z.B. die direkte Skalierung der den ω_{i-1} -Einfluss darstellenden Funktion aus dem vorangehenden Abschnitt um den vorliegenden Wert von K . Gemeinsam mit dem Einflussskalierungsfaktor κ ergibt sich die lineare Ansatzfunktion zu

$$\Omega_l^K = \kappa \cdot (|K| + 1). \quad (4.14)$$

Schematisch dargestellt ist diese lineare Ansatzfunktion für die K -Abhängigkeit in Abbildung 4.5.

Als nichtlineare Ansatzfunktion kann eine beliebige Funktion gewählt werden. Entscheidend ist das angestrebte Verhalten des Algorithmus, das durch den Einsatz der Funktion erreicht werden soll. Im vorliegenden Fall ist es wünschenswert, für hohe Werte von K dessen Einfluss nicht bis zu unendlich hoch zu gewichten. Gleichzeitig sollen bereits kleine Werte von K den Berechnungsablauf beeinflussen können. Für $K = 0$ soll gleich-

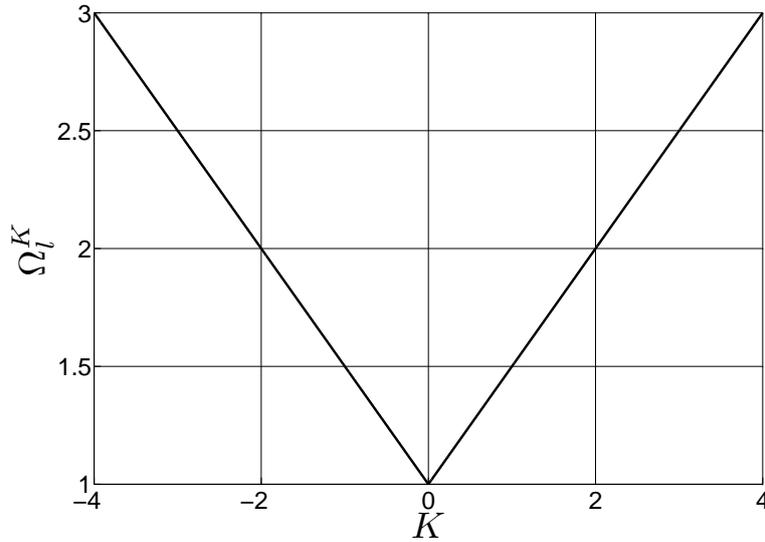


Abbildung 4.5: Lineare Ansatzfunktion für die K -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.

zeitig $\Omega_{nl}^K = 0$ gelten. Ein entsprechendes Verhalten findet sich unter anderem bei der Arkus-Tangens-Funktion. Diese steigt zunächst relativ steil an, besitzt jedoch die Eigenschaft

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \arctan(x) = \frac{\Pi}{2}.$$

Um den Einflussfaktor κ , der multiplikativ auf die Werte der Ansatzfunktion aufgebracht wird, im Nachhinein besser interpretieren zu können, wird die Funktion derart skaliert, dass ihr Grenzwert bei 1 liegt. Die Steigung der Funktion lässt sich durch eine Skalierung des Funktionsarguments erreichen. Dies geschieht über den im vorangegangenen Abschnitt bereits eingeführten Wert κ_{slope} .

Zusätzlich soll der K -Einfluss auf den ω_{i-1} -Einfluss ausschließlich verstärkend wirken, wozu die Funktion um den Wert 1 angehoben wird. Nach diesen Vorgaben lässt sich der nichtlineare K -Einfluss als

$$\Omega_{nl}^K = \frac{\arctan(K \cdot \kappa_{slope})}{\Pi/2} \cdot \kappa + 1 \quad (4.15)$$

darstellen. In Abbildung 4.6 ist die Funktion 4.15 schematisch dargestellt. Für den Fall, dass sich durch die Kombination von ω_{i-1} und K -Einfluss Werte für $\Delta\omega_i$ außerhalb des zulässigen Wertebereichs ergeben, wird eine sogenannte Watchdog-Funktion angewen-

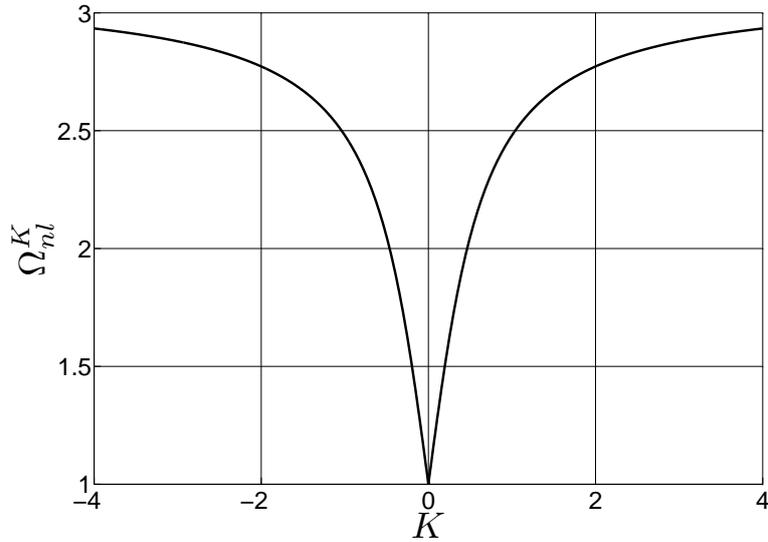


Abbildung 4.6: Nichtlineare Ansatzfunktion für die K -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.

det, die $\Delta\omega_i$ unabhängig der berechneten Werte auf diesen Bereich begrenzt. Die prinzipielle Funktionsweise des Algorithmus sowie ausgewählte mögliche Ansatzfunktionen sind hiermit beschrieben. In den folgenden Abschnitten werden darauf aufbauende Vorschläge für Kombinationen der Ansatzfunktionen erarbeitet

4.3.2 Linearer Algorithmus

Die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten linearen Ansatzfunktionen lassen sich zu einem rein linearen Algorithmus kombinieren.

Hierfür werden die Ansatzfunktionen für die ω_{i-1} -Abhängigkeit aus Gleichung 4.12 sowie für die K -Abhängigkeit aus Gleichung 4.14 multiplikativ überlagert. Hiermit ergibt sich die Grundgleichung des rein linearen Algorithmus zu

$$\Omega_l = \Omega_l^\omega \cdot \Omega_l^K = (|\Gamma_{\Xi u, o} - \omega_{i-1}|_{min}) \cdot \kappa \cdot (|K| + 1). \quad (4.16)$$

Hinzuzufügen sind die in Abschnitt 4.2.2 vorgestellten, und bis hierhin aufgrund der Übersichtlichkeit nicht dargestellten Faktoren

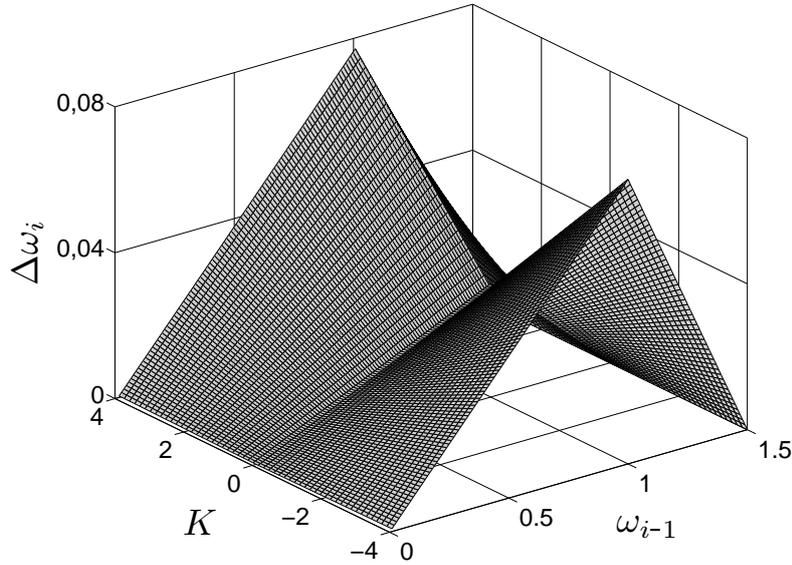


Abbildung 4.7: Linearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus

- Adaptionseinflussfaktor Φ
- künstliche Masse μ
- die Vorzeichenbestimmung über den Kennwert K .

Hiermit ergibt sich die Gleichung des rein linearen Algorithmus zu

$$\Omega_l = \Phi \cdot \mu \cdot \frac{K}{|K|} \cdot |\Gamma_{\Xi u, o} - \omega_{i-1}|_{min} \cdot \kappa (|K| + 1). \quad (4.17)$$

Zum besseren Verständnis des Algorithmus ist dieser für eine frei gewählte Parametrisierung ohne Berücksichtigung des Vorzeichens von K sowie Einflüssen von μ in Abbildung 4.7 in frei gewählten Grenzen für ω_{i-1} sowie K dargestellt. Für jede Kombination der Werte von ω_{i-1} und K kann der entsprechende Ergebniswert von Ω_l auf der dargestellten Fläche abgelesen werden. Zu erkennen ist die lineare Abhängigkeit von beiden aus der gekoppelten Berechnung erhaltenen Kennwerten ω_{i-1} und K . Für große Werte von K kann dessen Einfluss unter Einsatz der entsprechenden linearen Ansatzfunktion das Ergebnis für $\Delta\omega_i$ in beliebig hohem Maß bis zum Erreichen der geforderten Grenzen aus Gleichung 4.3 beeinflussen.

4.3.3 Nichtlinearer Algorithmus

Analog zu dem in Abschnitt 4.3.2 entwickelten rein linearen Algorithmus lassen sich die nichtlinearen Ansatzfunktionen für die ω_{i-1} -Abhängigkeit aus Gleichung 4.13 sowie die K -Abhängigkeit aus Gleichung 4.15 zu einem rein nichtlinearen Algorithmus kombinieren. Dies führt auf die Grundgleichung

$$\Omega_{nl} = \Omega_{nl}^{\omega} \cdot \Omega_{nl}^K = \frac{\cos((\omega_{i-1} - 1) \cdot \Pi) + 1}{2,5} \cdot \left(\frac{\arctan(K \cdot \kappa_{slope})}{\Pi/2} \cdot \kappa + 1 \right). \quad (4.18)$$

Ebenfalls analog zu Abschnitt 4.3.2 werden die entsprechenden Faktoren hinzugefügt sowie das notwendige Vorzeichen aus dem Kennwert K übernommen. Die Gleichung des rein nichtlinearen Algorithmus ergibt sich damit zu

$$\Omega_{nl} = \Phi \cdot \mu \cdot \frac{K}{|K|} \cdot \frac{\cos[(\omega_{i-1} - 1)\Pi \cdot \Xi_{u,o}] + 1}{2,5} \cdot \left(\frac{\arctan(K \cdot \kappa_{slope})}{\Pi/2} \cdot \kappa + 1 \right). \quad (4.19)$$

Zum besseren Verständnis des Algorithmus ist dieser für eine frei gewählte Parametrisierung ohne Berücksichtigung des Vorzeichens von K sowie Einflüssen von μ in Abbildung 4.8 in frei gewählten Grenzen für ω_{i-1} sowie K dargestellt. Analog zu Abbildung 4.7 für den rein linearen Stabilisierungsalgorithmus kann abhängig eines bekannten Wertes von ω_{i-1} und K der entsprechende Ergebniswert von Ω_{nl} auf der dargestellten Fläche abgelesen werden.

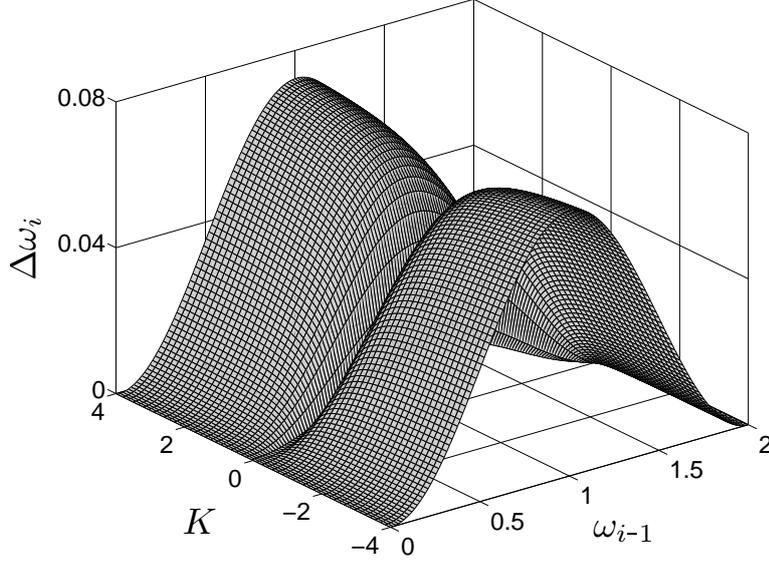


Abbildung 4.8: Nichtlinearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus.

4.3.4 Gemischt linearer-nichtlinearer Algorithmus

Über die reinen Kombinationen der linearen bzw. nichtlinearen Ansatzfunktionen hinaus ist auch ein gemischter Algorithmus aus linearer und nichtlinearer Ansatzfunktion möglich. Hierfür wird für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des Algorithmus die lineare Ansatzfunktion aus Gleichung 4.12 gewählt. Für die K -Abhängigkeit wird die nichtlineare Ansatzfunktion basierend auf der Arkustangens-Funktion aus Gleichung 4.15 verwendet. Die Auswahl wird getroffen, da die nichtlineare Funktion für die K -Abhängigkeit für große Werte von K im Gegensatz zum linearen Ansatz nicht beliebig hohe Werte für $\Delta\omega_i$ erzeugt.

Die Grundgleichung für den gemischten Algorithmus ergibt sich zu

$$\Omega_{l/nl} = \Omega_l^\omega \cdot \Omega_{nl}^K = (|\Gamma_{\Xi u, o} - \omega_{i-1}|_{min}) \cdot \left(\frac{\arctan(K \cdot \kappa_{slope})}{\Pi/2} \cdot \kappa + 1 \right). \quad (4.20)$$

Wiederum um die Faktoren Φ , μ sowie das aus K extrahierte Vorzeichen erweitert ergibt sich die Gleichung des gemischten Algorithmus zu

$$\Omega_{l/nl} = \Phi \cdot \mu \cdot \frac{K}{|K|} \cdot (|\Gamma_{\Xi u, o} - \omega_{i-1}|_{min}) \cdot \left(\frac{\arctan(K \cdot \kappa_{slope})}{\Pi/2} \cdot \kappa + 1 \right). \quad (4.21)$$

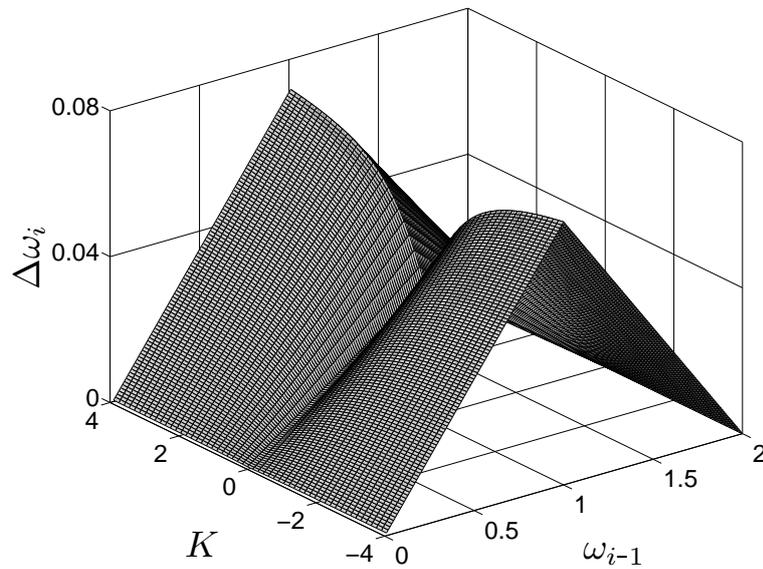


Abbildung 4.9: Gemischt linear-nichtlinearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus.

Zum besseren Verständnis des Algorithmus ist dieser für eine frei gewählte Parametrisierung ohne Berücksichtigung des Vorzeichens von K sowie Einflüssen von μ in Abbildung 4.9 in frei gewählten Grenzen für ω_{i-1} sowie K dargestellt. Analog zu Abbildung 4.7 für den rein linearen bzw. 4.8 für den rein nichtlinearen Stabilisierungsalgorithmus kann abhängig eines bekannten Wertes von ω_{i-1} und K der entsprechende Ergebniswert von $\Omega_{l/nl}$ auf der dargestellten Fläche abgelesen werden. Zu erkennen ist die lineare Abhängigkeit von $\Omega_{l/nl}$ von ω_{i-1} bei gleichzeitiger Begrenzung des maximalen Einflusses auf das Ergebnis für $\Delta\omega_i$ bei großen Werten von K .

5 Kalibrierung der adaptiven Stabilisierungsalgorithmen

In diesem Kapitel wird die Kalibrierung der Parameter der in Kapitel 4 erarbeiteten adaptiven Relaxationsalgorithmen durchgeführt. Zunächst wird die gewählte Methode zur Bestimmung des Verhaltens der Algorithmen abhängig von unterschiedlichen eingesetzten Parametersätzen vorgestellt. Anschließend werden Modelle mit kurzer Rechenzeit und deren Konfigurationen entwickelt, die zur Parametrisierung der Algorithmen herangezogen werden. Daraufhin werden die durchgeführten Berechnungen vorgestellt und die Ergebnisauswertung beschrieben. Es werden die Bewertungskriterien, die eine Parametrisierung als optimal gelten lassen, vorgestellt. Entsprechend der Kriterien wird einer der in Kapitel 4 erarbeiteten Algorithmen mit der als optimal erscheinenden Parametrisierung innerhalb des untersuchten Parameterbereichs für die in Kapitel 6 durchgeführten Verifikationsberechnungen ausgewählt. Die Kalibrierung geschieht für gekoppelte Problemstellungen nach den Gauß-Seidel-Verfahren bestehend aus zwei eingebundenen Programmen. Die Berechnungen und die Implementierung der entwickelten Algorithmen wird mithilfe des in dieser Arbeit entwickelten, in Anhang A ab Seite 110 beschriebenen Kopplungsprogramms durchgeführt.

5.1 Parameterstudien zur Kalibrierung

Die Parametrisierung der adaptiven Relaxationsalgorithmen hat entscheidenden Einfluss auf deren Effektivität und Effizienz. Die Anforderungen, die in Abschnitt 2.3 (Seite 37) an ein partitioniertes Multiphysiks simulationsverfahren gestellt wurden, beeinflussen die Definition eines optimalen Parametersatzes. Dieser muss den folgenden Ansprüchen in möglichst hohem Maß entsprechen:

- Reduzierung der benötigten Iterationen bis zum Erreichen von Konvergenz
- Großer Anwendungsbereich
- Vermeidung von Erzeugung zusätzlicher Instabilitäten durch den Stabilisierungsalgorithmus
- Stabiles Optimum der Wirkung des Algorithmus um auch in unbekanntem Berechnungsproblemstellungen möglichst zuverlässig stabilisierendes Verhalten sicher zu stellen.

Die Zielfunktion, deren Minimierung im Fokus einer Parametrisierungsbestimmung steht, ist die relative Beschleunigung η . Diese errechnet sich aus der Anzahl der benötigten Iterationen bis zum Erreichen der Konvergenz mit und ohne Einsatz eines der adaptiven Stabilisierungsalgorithmen $i_{\omega \text{ Konvergenz}}$ zu

$$\eta = \frac{i_{\omega \text{ Konvergenz}}}{i_{\text{Konvergenz}}}. \quad (5.1)$$

Wegen der Forderung nach einem möglichst großen Anwendungsbereich muss η global über eine größtmögliche Anzahl an Modellen und Modellkonfigurationen ein stabiles Optimum annehmen.

Die Parametrisierungsberechnung erfolgt daher auf Modellen mit möglichst unterschiedlichen Eigenschaften. Dies betrifft Linearität, Kondition und Konvergenzverhalten der Modelle. Die verwendeten Modelle sind in Abschnitt 5.2.1 sowie 5.2.2 dargestellt.

Zur Analyse des Einflusses unterschiedlicher Parametrisierungen der Algorithmen wird pro Modellkonfiguration jeweils eine Parameterstudie durchgeführt, in der die Parameter des Algorithmus modifiziert werden und die Berechnung der gekoppelten Problemstellung durchgeführt wird. Die aufwandsbezogenen Vorteile von Optimierungsverfahren bei der Suche nach optimalen Parametern gegenüber den hier eingesetzten Parameterstudien lassen sich im vorhandenen Anwendungsfall nicht nutzen. Es würde jeweils nur der modellspezifisch optimale Parametersatz gefunden werden. Durch den nur eingeschränkt möglichen modellübergreifenden Vergleich wäre das entsprechende globale Optimum nicht sicher auffindbar.

5.2 Modelle

Die vorgestellten und verwendeten Modelle unterscheiden sich unter anderem hinsichtlich Konvergenzverhalten, Kondition der gekoppelten Problemstellung sowie betrachteter physikalischer Effekte. Für die anfallenden Parameterstudien und Optimierungsaufgaben werden Modelle mit kurzer Berechnungszeit entwickelt. Die entsprechenden Gleichungen wurden als eigene Berechnungsprogramme implementiert, um in am Markt verfügbaren Programmen bestehenden Overhead an benötigter Berechnungszeit während des Programmstarts zu minimieren. Die verwendeten Gleichungen sind jeweils in der analytischen Form implementiert, sodass eine Lösung nur einige wenige mathematische Operationen benötigt. Hierdurch sind auch Parameterstudien mit einer hohen Anzahl an Parametervariationen in kurzer Zeit möglich. Dies ermöglicht eine breite Basis an Versuchsrechnungen zur optimalen Parametrisierung der entwickelten Algorithmen.

Bei der Auswahl der Vereinfachungen zur Verkürzung der Rechenzeit hat die Erhaltung der kopplungsseitig relevanten Effekte sowie der physikalischen Korrektheit Priorität. Bei allen Modellen wurde darüber hinaus auf die Möglichkeit der Ergebnisverifikation geachtet, um die Belastbarkeit der zentralen Aussagen und Annahmen dieser Arbeit belegen zu können. Diese kann bei den gewählten Problemstellungen durch direkte Auflösung der analytischen Gleichungen erfolgen.

5.2.1 Wärmeleitungs- und Wärmestrahlungsberechnung

Das Modell der gekoppelten Wärmeleitungs- und Wärmestrahlungsberechnung besteht aus einer unendlich ausgedehnten Wand. Auf einer Seite ist als Randbedingung die Temperatur festgelegt. Auf der anderen Seite findet ein Energieaustausch mit der Umgebung über Strahlung statt. Gesucht ist die resultierende Oberflächentemperatur T_1 der Wand (vgl. Abbildung 5.1).

Die Berechnung wird aufgeteilt in eine Berechnung der resultierenden Oberflächentemperatur durch Wärmeleitung und eine des durch Wärmestrahlung abgegebenen Wärmestroms an die Umgebung.

Die Wärmeleitungsrechnung hat als Ergebnis die resultierende Oberflächentemperatur T_1 abhängig von der Temperatur T_0 , der Wärmeleitfähigkeit λ sowie der Dicke t der

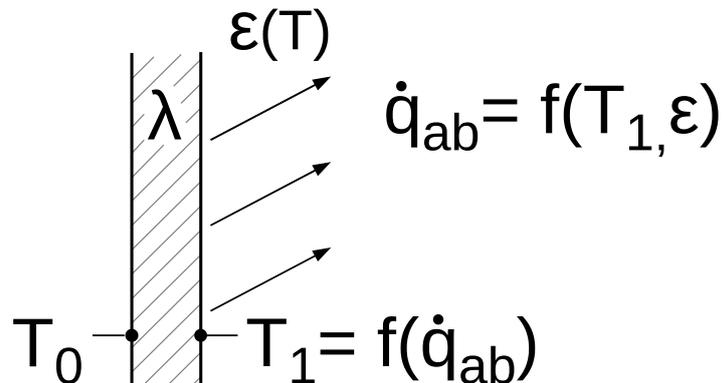


Abbildung 5.1: Testmodell "Nichtlineare eindimensionale gekoppelte Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung".

Wand und dem aus der Wärmestrahlungsberechnung resultierenden spezifischen Wärmestroms \dot{q} .

Die Wärmestrahlungsberechnung hat als Ergebnis den resultierenden spezifischen Wärmestrom \dot{q} aus vorgegebener Temperatur T_1 , Hintergrundstrahlungstemperatur T_U sowie einem Strahlungskoeffizienten ε .

Der stark unterschiedliche Charakter der resultierenden Gleichungssysteme z.B. in der Lösung mithilfe der FEM, vergrößert den benötigten Ressourcen- und Zeitaufwand bei monolithischer Implementierung (vgl. Abschnitt 2.1.1 auf Seite 6) enorm. Die behandelbare Modellgröße wird deutlich reduziert. Bei der internen partitionierten Multiphysiksimulation (vgl. Abschnitt 2.1.2 auf Seite 11), die im Allgemeinen für Modelle praxisrelevanter Größe in diesem Anwendungsfall verwendet wird, treten zu den hier vorhandenen numerischen Phänomenen vergleichbare Probleme hinsichtlich des Konvergenzverhaltens der Kopplung auf. In der linearen Problemstellung ist der Strahlungskoeffizient ε temperaturunabhängig.

Die verwendete Gleichung zur Berechnung der Oberflächentemperatur T_1 ist

$$T_1 = T_0 + \dot{q} \cdot \frac{t}{\lambda}. \quad (5.2)$$

Die Gleichung zur Berechnung des spezifischen Strahlungswärmestroms \dot{q} ist

$$\dot{q} = \sigma \cdot \varepsilon \cdot (T_1^4 - T_U^4) \quad (5.3)$$

mit der Stefan-Boltzmann-Konstante σ ($5,67 * 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$).

Nach Einsetzen der Variablen und der Gleichungen ineinander, lassen sich die analytischen Lösungen zu den in Tabelle 5.1 angegebenen Randbedingungen berechnen. Für das lineare Modell wird der Strahlungskoeffizient $\varepsilon = 0,8$ gesetzt und die Randbedingungen aus Tabelle 5.1 verwendet.

Parameter	Wert
T_0 [K]	500
T_U [K]	20
λ [$\frac{W}{mK}$]	5 / 6.5 / 8 / 9.5 / 11
t [m]	0.1

Tabelle 5.1: Randbedingungen des Modells Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung.

Zur Einbeziehung nichtlinearen Verhaltens der zu koppelnden Gleichungen wird das Modell um einen temperaturabhängigen Strahlungskoeffizienten $\varepsilon(T_1)$ erweitert. Konkret wird mit jeweils drei Temperaturen gearbeitet, zu denen ein Wert für ε vorgegeben wird. Die Temperaturwerte sind gewählt, um in Bereichen der Näherungslösungen für T_1 nahe dem Endergebnis der Berechnung unterschiedliche Gradienten des Abstrahlungskoeffizienten zu generieren. Zwischen den Temperaturwerten wird ε linear interpoliert, außerhalb der Temperaturwerte wird der entsprechende Randwert für ε konstant gehalten. Die verwendeten Werte sind in den Tabellen 5.2 sowie 5.3 angegeben.

Parameter	Wert
$\varepsilon(-200^\circ C)$	0,8
$\varepsilon(200^\circ C)$	0.4
$\varepsilon(300^\circ C)$	0.7

Tabelle 5.2: Randbedingungen für den Strahlungskoeffizienten des Modells nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung A.

Parameter	Wert
$\varepsilon(0^\circ C)$	0.8
$\varepsilon(400^\circ C)$	0.4
$\varepsilon(600^\circ C)$	0.7

Tabelle 5.3: Randbedingungen für den Strahlungskoeffizienten des Modells nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B.

Die Parametrisierung von ε aus Tabelle 5.3 für das Modell nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B wurde ohne die Werte 5 und 6,5 für λ durchgeführt. Durch die veränderten ε -Werte im Vergleich zur linearen Modellkonfiguration wird die Problemstellung zu schlecht konditioniert. Die Lösung der Problemstellung ist mithilfe des untersuchten partitionierten Schemas nicht möglich. Für $\lambda = 8$ lässt sich die Problemstellung nur unter Verwendung von Stabilisierungsoperationen berechnen. Exemplarische Ergebnisverläufe der Testmodelle für die lineare Parametrisierung von ε mit $\lambda = 5$ sowie der nichtlinearen Parametrisierung von ε für das Modell "Nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B" mit $\lambda = 8$ sind in Abbildung 5.2 dargestellt, um die unterschiedlichen Berechnungseigenschaften zu verdeutlichen. In allen Berechnungen wurde $\dot{q} = 50 \left[\frac{W}{m^2} \right]$ als Startwert gewählt.

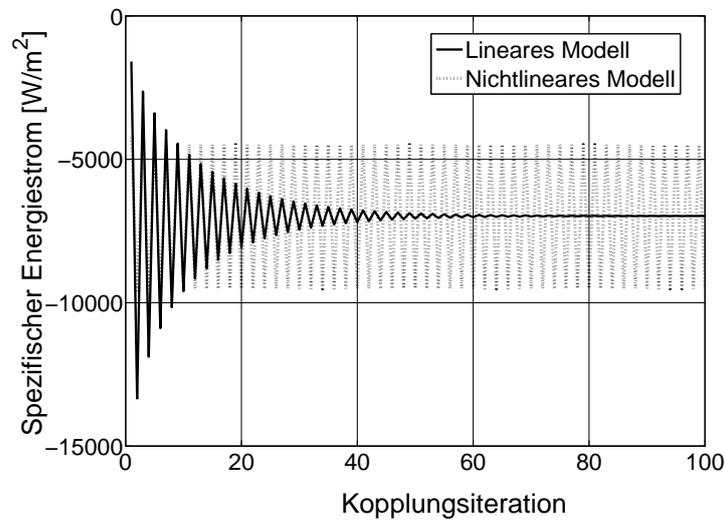


Abbildung 5.2: Ergebnisverlauf des durch Abstrahlung abgegebenen Wärmestroms des linearen sowie nichtlinearen Modells Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B.

5.2.2 Fluid-Struktur Interaktionsberechnung

Die Berechnung der Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung bestimmt die Lage einer am unteren Ende drehbar gelagerten Platte, die von einem Fluid angeströmt wird, abhängig der vorgegebenen Modellparameter und Randwerte. Die Modelle sind in den Abbildungen 5.3 sowie 5.5 dargestellt. Die Berechnung wird aufgeteilt in eine Berechnung des Fluiddruckes auf die Platte und eine Berechnung der aus dem Fluiddruck resultierenden Anstellwinkels dieser.

Die Fluidberechnung bestimmt aus den vorgegebenen Randwerten der Strömung (φ, ρ, v_x) sowie dem aus der Strukturberechnung resultierenden Anstellwinkels der Platte (φ und dessen Widerstandsbeiwert c_w) den auf diese wirkenden Druck p .

Die Strukturberechnung bestimmt aus dem Druck p abhängig von der eingestellten Federsteifigkeit der Plattenlagerung c einen neuen resultierenden Anstellwinkel.

Die kombinierte Berechnung struktur- und fluidmechanischer Problemstellungen ist ein in Forschung und Industrie im Fokus stehender Aufgabenbereich. Die gekoppelte Problemstellung weist häufig schlechte Kondition auf und ist daher mit partitionierten Ansätzen, sofern die Lösung überhaupt möglich ist, oft ausschließlich unter Einsatz geeigneter Stabilisierungsverfahren lösbar.

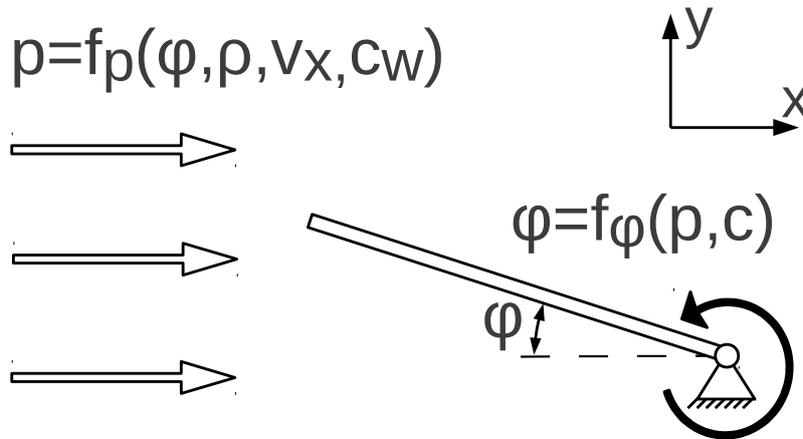


Abbildung 5.3: Testmodell "FSI mit nahezu waagrecht Initialposition".

Die beiden Modelle unterscheiden sich physikalisch in der Ruhelage der Platte solange kein Fluiddruck wirkt, also $v_x = 0$ gilt. In dem in Abbildung 5.3 dargestellten Modell befindet sich die Platte in der nahezu waagrecht Position in Ruhe. Für die Berechnung wird ein anfänglicher Wert von $\varphi = 0,001^\circ$ vorgegeben, um die Eindeutigkeit der Lösung herzustellen und ein Moment um den Plattenlagerungspunkt in der Ruhelage zu erzeugen. Die Berechnung des Fluiddrucks p geschieht über die Formel

$$p = c_w \cdot \rho \cdot \frac{v_x^2}{2}. \quad (5.4)$$

Über die senkrecht angeströmte Fläche der Platte, die sich zu

$$A = \sin(\varphi) \cdot A_{Platte} \quad (5.5)$$

ergibt, lässt sich schließlich das im Fußpunkt der Platte wirkende Moment durch

$$M = p \cdot A \cdot \frac{h_{Platte}}{2} \quad (5.6)$$

berechnen. Mit diesem Moment lässt sich in der Strukturberechnung wiederum ein neuer Anstellwinkel φ berechnen durch

$$\varphi = \frac{M}{c}. \quad (5.7)$$

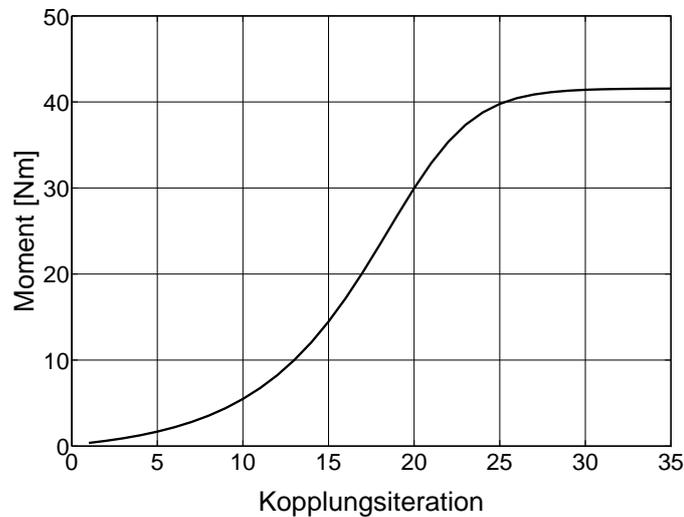


Abbildung 5.4: Ergebnisverlauf des durch den Fluiddruck hervorgerufenen Moments auf den Lagerpunkt der Platte im Modell Fluid-Struktur Interaktion mit nahezu waagerechter Initialposition mit $\rho = 140 \frac{kg}{m^3}$.

In dem in Abbildung 5.5 dargestellten Modell befindet sich die Platte in der Senkrechten in Ruhe. Dementsprechend verändert sich die Berechnung der senkrecht angeströmten Plattenfläche aus Gleichung 5.5 zu

$$A = \cos(\varphi) \cdot A_{Platte}. \quad (5.8)$$

Gleichungen 5.4, 5.6 und 5.7 bleiben unverändert.

Der Konvergenzverlauf der gekoppelten Berechnung stellt sich im Fall der senkrechten Ruhelage als alternierend dar. Im waagerechten Fall ist der Konvergenzverlauf asymptotisch (vgl. Abbildung 5.4). Je nach den gewählten Randbedingungen der Modelle verändert sich die Anzahl der benötigten Iterationen bis zum Erreichen des Konvergenzkriteriums. Die Einstellung unterschiedlicher Konvergenzeigenschaften geschieht über die Veränderung der Dichte ρ des strömenden Fluids. Für beide Modelle sind die gewählten Werte für ρ $65 \frac{kg}{m^3}$, $80 \frac{kg}{m^3}$, $95 \frac{kg}{m^3}$, $110 \frac{kg}{m^3}$, $125 \frac{kg}{m^3}$ und $140 \frac{kg}{m^3}$. Oberhalb der Fluidichte von $140 \frac{kg}{m^3}$ ist das resultierende Gleichungssystem zu schlecht konditioniert um die Problemstellung nach einem partitionierten Ansatz unter Verwendung von Fixpunktiterationsverfahren behandeln zu können.

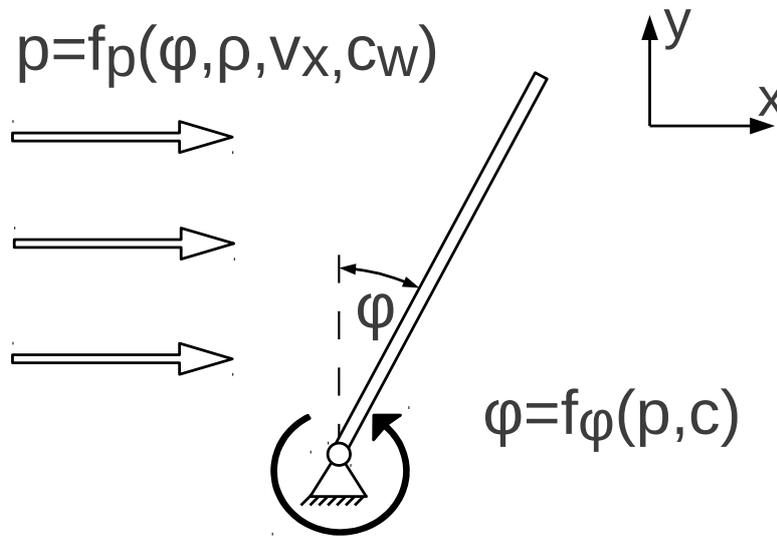


Abbildung 5.5: Testmodell "FSI mit senkrechter Initialposition".

5.3 Berechnungen

In diesem Abschnitt wird die Konfiguration und Auswertungsmethode für die durchgeführten Parameterstudien beschrieben.

5.3.1 Variierte Parameter und Schrittweiten

Für alle vorgestellten Modelle, Modellkonfigurationen und jeden Algorithmus wird je eine Parameterstudie durchgeführt um den Einfluss veränderter Parameter des Stabilisierungsalgorithmus auf $i_{Konvergenz}$ zu bestimmen. Die zu bestimmenden Parameter (vgl. Gleichungen 4.17, 4.19 sowie 4.21) werden in den in Tabelle 5.4 dargestellten Parametergrenzen und Schrittweiten variiert. Die Parameterschritte und -grenzen wurden anhand vorangegangener Testberechnungen gewählt. Bei der vorliegenden hohen Anzahl an Parametern steigt der numerische Aufwand der Parameterstudie stark bereits bei nur geringfügiger Erhöhung der eingestellten Auflösung sowie der Vergrößerung des abgedeckten Feldes der Analyse. Die Parameterschrittweiten wurden daher möglichst groß gewählt bei gleichzeitig ausreichender Abdeckung des untersuchten Bereichs. Dieser wur-

Parameter	Untere Grenze	Obere Grenze	Schrittweite
Φ	0	0.15	0.0094
Ξ_u	0.3333	1	0.08333
Ξ_o	0.3333	1	0.08333
κ	0	5	0.5
κ_{slope}	0.1	5	0.49
μ	0	1	0.2

Tabelle 5.4: Konfiguration der Parameterstudien zur Parametrisierung der adaptiven Stabilisierungsalgorithmen.

de so groß gewählt, dass die Effektivität des erarbeiteten Prinzips mit den gefundenen Parameterkombinationen im nachfolgenden Kapitel verifiziert werden kann.

Für jeden Algorithmus wurde jeweils sowohl die Relaxation der übergebenen Ergebnisvektoren nur eines als auch beider Berechnungen untersucht. Zusätzlich wurde ein anfänglicher, fest vorgegebener Relaxationsparameter sowohl von 1, was dem unrelaxierten Gauß-Seidel-Verfahren entspricht, als auch von 0,7, was einer moderaten Unterrelaxation entspricht, untersucht. Es wurden dementsprechend $1,8 \cdot 10^8$ gekoppelte Berechnungen in den Parameterstudien durchgeführt.

5.3.2 Methode der Ergebnisanalyse

Um unter den berechneten Parametervarianten und entsprechenden Zielfunktionen ein globales, stabiles Optimum zu finden, müssen die Ergebnisse aller Modelle und Modellkonfigurationen über eine Auswertungsmethode miteinander in Beziehung gesetzt und anschließend bewertet werden. Zu beachten ist dabei, dass modellspezifische, überproportional ausgeprägte lokale Optima nicht berücksichtigt werden sollen, um möglichst allgemeingültige, übertragbare Ergebnisse zu erhalten. Diese Optima entstehen durch modellspezifische Eigenschaften des Berechnungsverlaufs. Bereits bei geringfügigen Änderungen der Startwerte oder Modellparameter verschwinden bzw. verschieben sich diese lokalen Optima.

In Grafik 5.6 sind solche lokalen Optima, die in der Grafik den lokal ausgeprägten Minima von $i_{Konvergenz}$ entsprechen, zu erkennen. Diese liegen abseits des deutlich und breit ausgeprägten globalen Optimums der Antwortfläche im Bereich von $0,1 \leq \Phi \leq 0,2$.

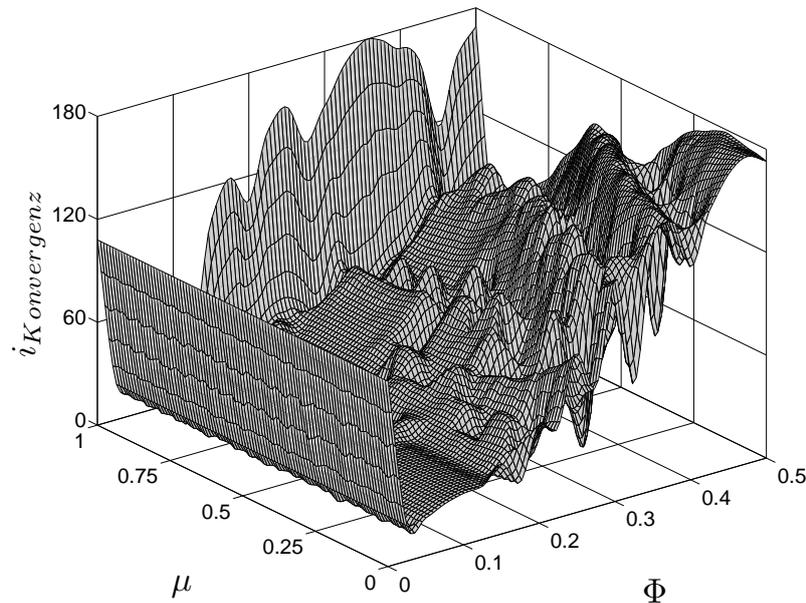


Abbildung 5.6: Kubisch interpolierte Antwortfläche einer 2-dimensionalen Parameterstudie.

Graphische Auswertungen sind nicht exakt nachvollziehbar und aufgrund der höherdimensionalen Parameterstudien im vorliegenden Fall nicht möglich.

Zur automatisierten und nachvollziehbaren Eliminierung instabiler Minima aus der abschließenden Auswertung der Parameterstudien wird eine l -dimensional einsetzbare Filterfunktion entwickelt und verwendet. Die Filterfunktion glättet die bei den durchgeführten l -dimensionalen Parameterstudien entstehende Hyperflächen im \mathbb{R}^{l+1} . Globale stabile Optima werden durch den Filter nur in geringem Maß beeinflusst. Lokale instabile Optima werden weitestgehend entfernt. Der in Abbildung 5.8 für die Anwendung auf das Ergebnis einer 2-dimensionalen Parameterstudie schematisch dargestellte Glättungsstern berechnet an jedem diskret ausgewerteten Punkt der Parameterstudie einen geglätteten Zielwert $\bar{\eta}$. In der Abbildung wird für den durch das dick durchgezogene umrandete Feld dargestellten Zielwert $\eta_{n,m}$, der durch die Parametrisierung des Algorithmus mit den Werten n und m in der Parameterstudie erhalten wird, der geglättete Werte $\bar{\eta}_{m,n}$ errechnet. Hierfür werden die Zielwerte mit herangezogen, die durch die Variation jeweils eines der Parameter in positiver und negativer Richtung um eine Schrittweite entstehen. Dies ist in der Abbildung durch die dünn durchgezogen umrandeten Felder dargestellt. Der verwendete Filter wertet dabei die herangezogenen Ergebnisse so, dass $\eta_{m,n}$ und die umliegenden Werte zusammengerechnet jeweils zu 50 % den Wert $\bar{\eta}_{m,n}$ be-

einflussen. Dieser wird anstelle der ursprünglich errechneten Lösung zur Auswertung der Parameterstudie verwendet. Die auf eine beliebige Anzahl an Dimensionen verallgemeinerte Berechnungsvorschrift für diesen Vorgang lautet für eine mit dem Parametersatz k errechnete Zielfunktion

$$\bar{\eta}(k) = \frac{1}{2}\eta(k) + \frac{1}{4l} \sum_{j=1}^l \eta(k, P_j - h(P_j)) + \eta(k, P_j + h(P_j)). \quad (5.9)$$

Darin steht $\eta(k, P_j - h(P_j))$ bzw. $\eta(k, P_j + h(P_j))$ für den Zielwert der Parameterstudie bei gleichem Parametersatz wie der für $\eta(k)$ verwendete, lediglich mit um eine Schrittweite h des Parameters P_j erhöhten oder verringerten Wert für P_j anstelle des in k ursprünglich eingesetzten.

Durch zweifache Anwendung der Funktion auf einen Ergebnisdatensatz werden für jeden Parameter in jeder Richtung die zwei nächsten Nachbarergebnisse sowie Mischergebnisse durch Variation mehrerer Parameter gleichzeitig berücksichtigt. Die Komplexität des Glättungsalgorithmus bleibt dabei deutlich geringer im Vergleich zu einer Funktion, die bei einmaliger Anwendung den gleichen Effekt hat.

In Abbildung 5.6 (S. 75) ist das Ergebnis einer Parameterstudie mit zwei variierten Parametern dargestellt. Der Effekt zweifacher Anwendung der Filterfunktion auf diese Parameterstudienenergebnisse ist in Abbildung 5.7 (S. 77) ersichtlich. Das globale Optimum im Bereich von $0,1 \leq \Phi \leq 0,2$ bleibt weiterhin erhalten, lokale Optima werden nahezu völlig eliminiert.

Im Randbereich einer Dimension, in dem für diese nur ein benachbarter Zielwert gefunden werden kann, wird dieser Parameter nicht in der Glättung berücksichtigt. Die Faktoren der Berechnungsvorschrift verändern sich in diesem Fall entsprechend der Anzahl der berücksichtigten Dimensionen das Verhältnis von zentralem Wert $\eta(k)$ zu den umliegenden Werten beizubehalten. Durch dieses Vorgehen im Randbereich wird eine ungewünschte Abschwächung von Werten auf den Rändern des Gebiets und damit eine Ergebnisverfälschung weitestgehend verhindert.

Die nach der Glättung vorhandenen Zielfunktionen können zur Auswertung abschließend über alle Modelle verrechnet und, abhängig von der gewählten Definition einer optimalen Parameterkombination, analysiert werden.

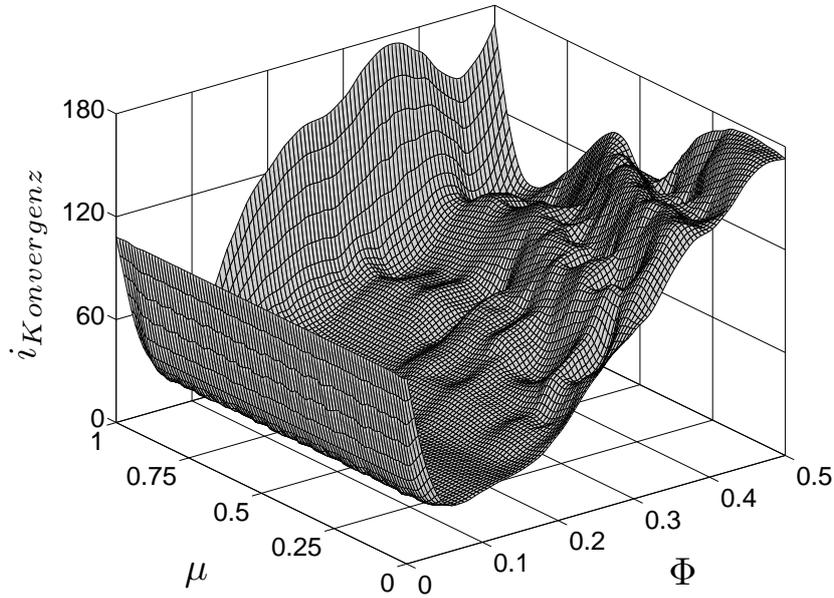


Abbildung 5.7: Kubisch zwischen den Zielwerten der Parameterstudie interpolierte Antwortfläche einer zweidimensionalen Parameterstudie nach zweifacher Anwendung der Glättungsfunktion.

$\eta_{m-2,n-2}$	$\eta_{m-2,n-1}$	$\eta_{m-2,n}$	$\eta_{m-2,n+1}$	$\eta_{m-2,n+2}$
$\eta_{m-1,n-2}$	$\eta_{m-1,n-1}$	$\eta_{m-1,n}$	$\eta_{m-1,n+1}$	$\eta_{m-1,n+2}$
$\eta_{m,n-2}$	$\eta_{m,n-1}$	$\eta_{m,n}$	$\eta_{m,n+1}$	$\eta_{m,n+2}$
$\eta_{m+1,n-2}$	$\eta_{m+1,n-1}$	$\eta_{m+1,n}$	$\eta_{m+1,n+1}$	$\eta_{m+1,n+2}$
$\eta_{m+2,n-2}$	$\eta_{m+2,n-1}$	$\eta_{m+2,n}$	$\eta_{m+2,n+1}$	$\eta_{m+2,n+2}$

Abbildung 5.8: Schematische Darstellung der auf die Ergebnisse einer zweidimensionalen Parameterstudie angewendeten Glättungsfunktion.

5.4 Auswahl von Algorithmus und Parameter

5.4.1 Bewertungskriterien

Die Auswahl der globalen Bewertungsfunktion ist Ausdruck eines zu definierenden Optimumbegriffs, und damit abhängig von dem Fokus, der hinsichtlich des praktischen Einsatzes des Algorithmus gewählt wird. Mögliche globale Bewertungsgrundlagen im Rahmen der in Abschnitt 5.1 genannten Kriterien legen das Hauptaugenmerk z.B. auf

- die Stabilisierung schlecht konditionierter resultierender gekoppelter Gleichungssysteme.
- die Beschleunigung häufig in der Praxis auftretender gut konditionierter Gleichungssysteme.
- die Sicherstellung von Stabilität und Beschleunigung gleichermaßen, auch wenn das modellspezifische Beschleunigungsmaximum in keinem Modell erreicht wird.

In dieser Arbeit wird ein Kriterium verwendet, das sich am dritten der genannten Kriterien orientiert. Diese Auswahl stellt weitestmögliche Einsetzbarkeit ohne Notwendigkeit von Nutzereingriffen in den Vordergrund.

Die Bewertung der Parametersätze über alle Modelle hinweg wird durch die Errechnung einer globalen Zielfunktion aus den Zielfunktionen der einzelnen Modelle bewerkstelligt. Die geglätteten Zielfunktionen $\bar{\eta}$ gleicher Parametersätze über den Modellen werden als RMS-Wert zu einem Wert $\bar{\eta}_{global}$ zusammengefasst. Dies geschieht über die Formel

$$\bar{\eta}_{global} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \bar{\eta}_i^2}{n}} \quad (5.10)$$

Die zunächst erfolgende Quadrierung der einzelnen Zielfunktionen gewichtet durch eine Parametrisierung destabilisierte Berechnungen überproportional stark im Vergleich zu stark stabilisierten bzw. stark beschleunigten Berechnungen. Die Parametrisierung mit dem niedrigsten zugehörigen η_{global} -Wert wird entsprechend der genannten Kriterien als die Optimale angesehen.

Algorithmus	Φ	Ξ_u	Ξ_o	κ	κ_{slope}	μ
L(1,a)	0.05	1	1	1.1111	-	0.8
L(1,b)	0.02	1	1	2.2222	-	0.8
L(0.7,a)	0.03	1	1	1.6667	-	0.8
L(0.7,b)	0.05	1	0.6667	2.7778	-	0.8
NL(1,a)	0.03	1	0.6667	5	2.2778	0.8
NL(1,b)	0.04	1	0.6667	5	0.6444	0.8
NL(0.7,a)	0.09	1	0.4	2.2222	1.1889	0.8
NL(0.7,b)	0.09	1	0.6667	5	1.1889	0.8
L/NL(1,a)	0.03	1	1	3.8889	2.2778	0.8
L/NL(1,b)	0.03	1	1	3.8889	1.1889	0.8
L/NL(0.7,a)	0.04	1	1	3.3333	1.1889	0.8
L/NL(0.7,b)	0.09	1	1	1.6667	5	0.8

Tabelle 5.5: Aus der Auswertung der Parameterstudien als optimal gefundene Parameterkombinationen für die untersuchten Algorithmen.

5.4.2 Ergebnisse

Mithilfe der in Abschnitt 5.3.2 entwickelten Auswertungsmethode höherdimensionaler Parameterstudien wurden die Ergebnisse der beschriebenen Parameterstudien für die in Kapitel 4 (S. 46 ff.) entwickelten Algorithmen analysiert. Für jeden der untersuchten Algorithmen wurde dabei die optimale Parametrierung errechnet. In Tabelle 5.5 sind die optimalen Parametrisierungen der entwickelten Algorithmen dargestellt. Die Bezeichnungen der Algorithmen sind in der Tabelle analog zu Abbildung 5.9 (S. 80) angegeben. Der Parameter Ξ_u ergibt sich jeweils als optimal, wenn der gesamte Bereich für die ω_{i-1} von 0 bis 1 abgedeckt wird. Die Skalierung des unterrelaxierenden Bereichs der Algorithmen ist dementsprechend nicht als vorteilhaft anzusehen. Für die Algorithmen NL(1,a), NL(1,b) und NL(0.7,b) ergeben sich für κ Werte von 5 als optimal. Für den Algorithmus L/NL(0.7,b) ergibt sich der gleiche Wert für den Parameter κ_{slope} . Da diese Werte auf den Rändern des untersuchten Wertebereichs liegen, ist eine weitere Verbesserung der erzielbaren Ergebnisse durch eine Erhöhung des entsprechenden Grenzwertes als möglich anzusehen.

Die mit den optimalen Parametern erreichten Stabilisierungswerte über alle Modelle sind in Abbildung 5.9 graphisch dargestellt. Die Abbildung stellt einen sogenannten Boxplot dar. Die Ergebnisse der Parameterstudien für jeweils einen Algorithmus werden durch eine Box in der Graphik repräsentiert. Die gestrichelte, schwarze Linie innerhalb

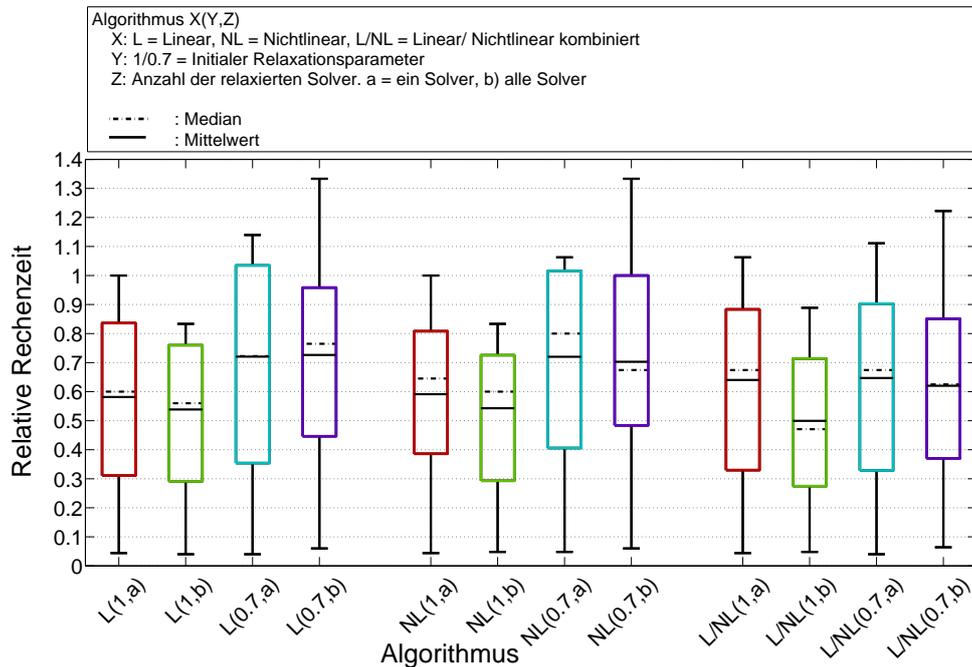


Abbildung 5.9: Relative Rechenzeit unter Einsatz der optimal parametrisierten adaptiven Stabilisierungsalgorithmen.

der Box stellt den Median dar. D.h. jeweils 50% der Ergebnisse für die einzelnen berechneten Modelle liegen über bzw. unter diesem Wert. Die durchgezogene, schwarze Linie innerhalb der Box stellt den Mittelwert dar. Durchschnittlich benötigen die stabilisierten Berechnungen diese relative Anzahl an Kopplungsiterationen bzw. relative Rechenzeit im Vergleich zur nicht stabilisierten Berechnung. Die Box an sich spannt sich zwischen dem oberen und unteren Quartil der relativen Rechenzeit auf. Die nach oben und unten herausragenden Linien reichen bis zum höchsten bzw. niedrigsten erzielten Wert über alle Modelle.

Die Boxen sind nach dem verwendeten Algorithmus gruppiert. Jeweils gleiche Grundeinstellungen über den Algorithmen sind zur besseren Vergleichbarkeit in der gleichen Farbe dargestellt, als auch auf der Abszisse des Diagramms ablesbar.

In der Darstellung werden einige generelle Zusammenhänge ersichtlich. Zunächst sind innerhalb jeder zu einem Algorithmus gehörenden Gruppierung die Verhältnisse zwischen den unterschiedlichen Parametrisierungen vergleichbar. Für einen initialen Relaxationsparameter von 1 ergeben sich stets bessere Ergebnisse hinsichtlich Median, Mittelwert und höchste relative Rechenzeit im Vergleich zu einer Initialrelaxation von 0,7.

Weiterhin ergeben sich für die Relaxation aller in einer gekoppelten Berechnung eingebundenen Programme bzw. Gleichungssysteme stets bessere Werte als für die Unterrelaxation jeweils eines Programms bzw. Gleichungssystems.

Im optimalen Fall für jeden Algorithmus mit einer Initialrelaxation von 1 und einer Relaxation aller eingebundener Programme arbeiten der rein lineare und der rein nichtlineare Algorithmus in Bezug auf die höchste erzielte relative Rechenzeit im untersuchten Parameterbereich geringfügig besser als der gemischt linear-nichtlineare Algorithmus. Bei diesem stellen sich die restlichen Kennwerte als positiver dar. Die Berechnung mit der schlechtesten relativen Rechenzeit ist im Gegensatz zu den anderen Algorithmen bei diesem diejenige, mit den geringsten Iterationen im unrelaxierten Fall, in dem ohnehin nur eine geringfügige Berechnungszeitverkürzung möglich ist.

Die Ergebnisse der Parameterstudien zeigen, vor dem Hintergrund der gewählten Kriterien und des zentral im untersuchten Parameterbereich liegenden Optimums, dass der gemischt linear-nichtlineare Algorithmus mit einer Initialrelaxation von 1 für die im folgenden Kapitel durchgeführte Verifikation des Prinzips des Stabilisierungsverfahrens am besten geeignet ist.

6 Verifikation der Algorithmen

In diesem Kapitel werden Verifikationsberechnungen für die Effektivität des in Kapitel 4 erarbeiteten Prinzips zur Stabilisierung gekoppelter Berechnungen durchgeführt. Die Problemstellungen werden jeweils ohne und mit Einsatz des in Kapitel 5 ausgewählten kombiniert linear-nichtlinearen adaptiven Relaxationsalgorithmus durchgeführt. Die Effekte auf den Verlauf der gekoppelten Berechnung werden analysiert.

Die Berechnungen werden mithilfe des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Kopplungsprogramms durchgeführt. Das Prinzip zur Ankopplung der Berechnungsprogramme sowie das entwickelte Kopplungsprogramm sind im Anhang beschrieben.

6.1 Thermische Fluid-Struktur Interaktion

6.1.1 Problemstellung

Die Problemstellung einer thermischen Fluid-Struktur Interaktion wird durch das Modell eines Gegenstromwärmetauschers für Fluide gebildet. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind in der Darstellung des Modells in Abbildung 6.1 die Strukturelemente, die das Fluidmodell umgeben, nicht enthalten. Der Wärmetauscher besteht aus einem Hauptrohr (Länge 70cm, $\varnothing_i = 20\text{cm}$, Wandstärke = 2mm), dessen Wand aus Edelstahl mit einer Wärmeleitfähigkeit von $20 \frac{W}{m \cdot K}$ gefertigt ist. Durch das Hauptrohr führen 16 Innenrohre ($\varnothing_i = 10\text{mm}$, Wandstärke = 1mm) aus Kupfer mit einer Wärmeleitfähigkeit von $380 \frac{W}{m \cdot K}$. An den Enden des Hauptrohres ist jeweils ein Verteilerstück angebracht, durch das das durch die Innenrohre geführte Fluid vom Einlass auf diese verteilt wird bzw. zum Auslass geführt wird. Die Ein- und Auslässe sind quadratisch ausgeführt (Breite und Höhe jeweils 2,5cm). In Abbildung 6.1 sind von links oben nach rechts unten zunächst

Parameter	Wert
Dichte $[\frac{kg}{m^3}]$	1000
Spez. Wärmekapazität $c_p [\frac{J}{kg \cdot K}]$	4184
Kinematische Viskosität $[\frac{m^2}{s}]$	$9 \cdot 10^{-7}$
Laminare Prandtl Zahl	7
Turbulente Prandtl Zahl	0.8

Tabelle 6.1: Materialkennwerte des in der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung verwendeten Fluides bei der Referenztemperatur 300 K.

der Auslass der Innenrohre, der Einlass des Hauptrohrs, der Auslass des Hauptrohrs und der Einlass der Innenrohre dargestellt. Die Materialkennwerte des Fluides sind in Tabelle 6.1 dargestellt. Im betrachteten Betriebszustand befindet sich der Wärmetauscher in einer Umgebung von 20°C gegen die ein Energieaustausch über Strahlung mit einem Strahlungskoeffizienten von $\varepsilon = 0,8$ stattfindet. Der Volumenstrom beider Fluidströme beträgt $225 \frac{l}{h}$. Die Einströmtemperatur des Hauptrohres liegt bei 10°C , die der Innenrohre bei 90°C .

Während der Berechnung werden an den Elementen, an denen sich Fluid und Struktur berühren, Ergebnisse übergeben. Dem Strukturberechnungsprogramm werden aus dem Strömungszustand resultierende Temperaturen der wandnahen Fluidschicht sowie Wärmeübergangskoeffizienten übergeben. Das Programm berechnet entsprechende Wandtemperaturen. Diese werden dem Fluidberechnungsprogramm als Randbedingung vorgegeben. Die Berechnung beginnt mit der Fluidberechnung bei vorgegebenen Wandtemperaturen von 0°C .

Die Berechnung wird als statischer Lastfall durchgeführt. Es wird je einmal stabilisiert und unstabilisiert gerechnet. Die Strukturberechnung der Wärmeleitung und -strahlung wird mithilfe des thermischen, FE-basierten Berechnungsprogramms THESEUS-FE[®] ([14]) in der Programmversion 4.1 durchgeführt. Das darin verwendete Modell besteht aus 232204 Schalen- sowie 193552 Volumenelementen. Die Fluidberechnung wird durch das FVM-basierte Strömungsberechnungsprogramm OpenFOAM[®] ([17]) in der Programmversion 2.1 abgebildet. Das Strömungsmodell besteht aus 1110552 Volumenelementen. Die Anzahl der Elemente, deren Temperaturfreiheitsgrade gekoppelt werden beträgt 165244. Abbildung 6.2 zeigt den Ablauf der gekoppelten Berechnung.

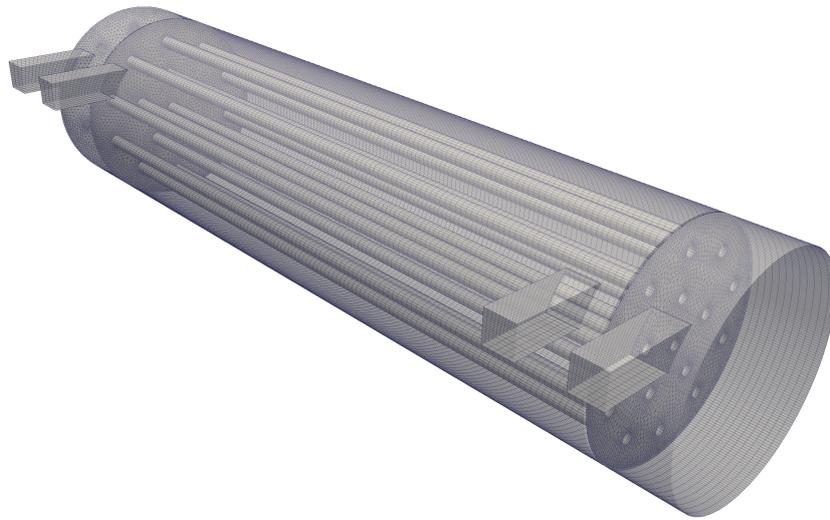


Abbildung 6.1: Modell des gekoppelt zu berechnenden Wärmetauschers. Die Elemente der Struktur sind ausgeblendet.

6.1.2 Ergebnisse

Die stabilisierte und die ungestabilisierte Berechnung führen bis zur verwendeten numerischen Auflösung zu dem gleichen Ergebnis für die Strömungs- und Wandtemperaturen. In den Abbildungen 6.3 bis 6.5 sind Ergebnisse aus ausgewählten Kopplungsiterationen dargestellt. Mit zunehmender Entfernung von den Einlässen wird, wie zu erwarten, eine höhere Anzahl an Kopplungsiterationen benötigt um das Endergebnis zu erreichen. In den Abbildungen lässt sich dies an der sukzessiven Erwärmung der unterschiedlichen Bereiche der Struktur über den dargestellten Kopplungsiterationen erkennen.

In den Abbildungen 6.6 sowie 6.7 sind der maximal auftretende elementspezifische und der über den gekoppelten Freiheitsgraden gemittelte globale Fehler dargestellt. Der globale Fehler bezeichnet in diesem Fall analog zu dem gleichen Begriff, der in der iterativen Lösung linearer Gleichungssysteme verwendet wird, die Differenz zwischen dem aktuellen Iterationsergebnis zum Endergebnis der Berechnung. Zur Steigerung der Aussagekraft wurde der globale Fehler für die vorliegende Darstellung nicht durch Abschätzung aus dem lokalen Fehler bestimmt. Die Berechnungen wurden solange ausiteriert bis der lokale Fehler ausschließlich auf die numerische Genauigkeit zurückzuführen war.

Das somit erhaltene Ergebnis, das zwischen stabilisierter und ungestablisierter Berechnung deckungsgleich ist, wurde zur Bildung des globalen Fehlers herangezogen.

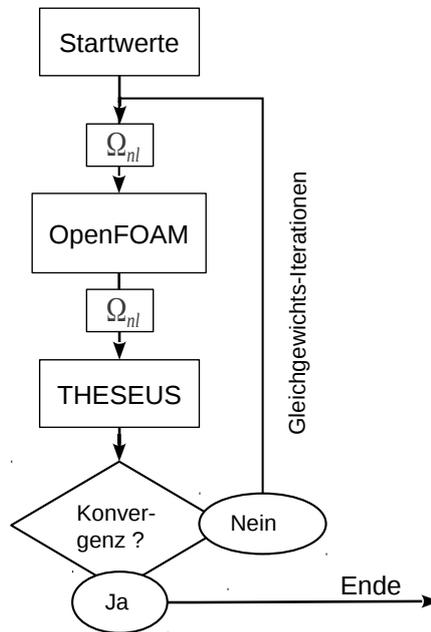


Abbildung 6.2: Ablaufdiagramm der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung.

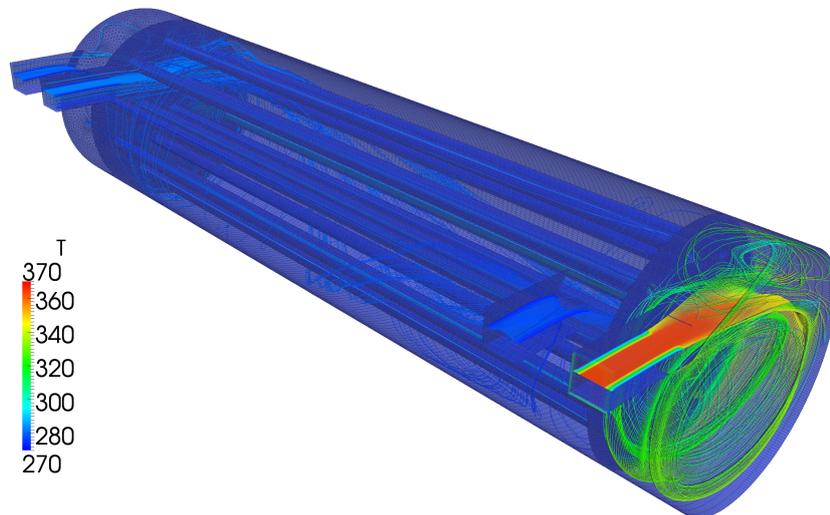


Abbildung 6.3: Ungekoppelt berechnetes Ergebnis der Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher.

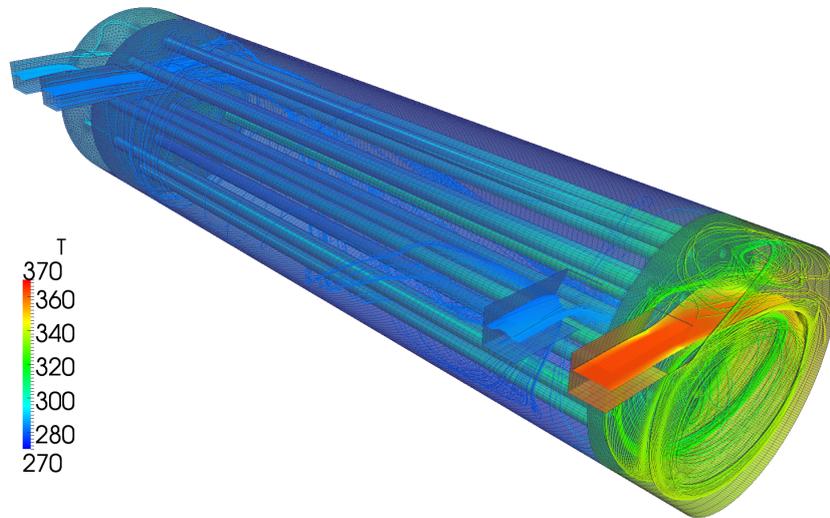


Abbildung 6.4: Zwischenergebnis der gekoppelt berechneten Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher nach zwei Iterationen.

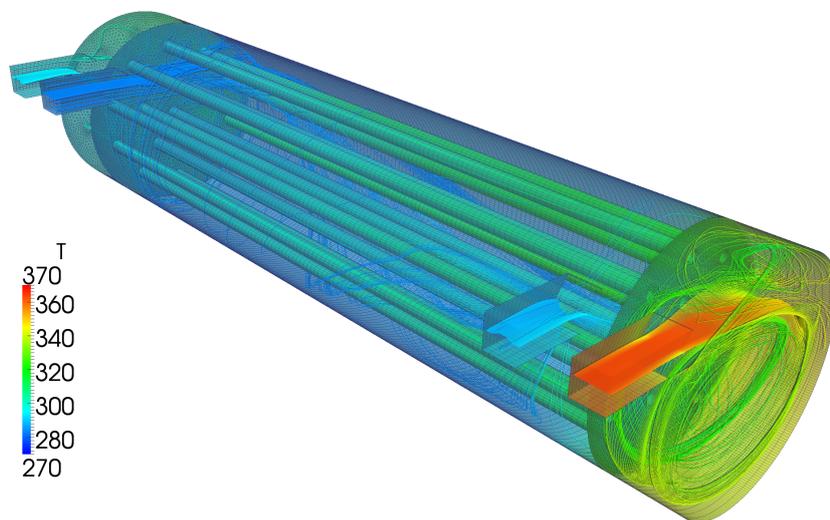


Abbildung 6.5: Endergebnis der gekoppelt berechneten Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher.

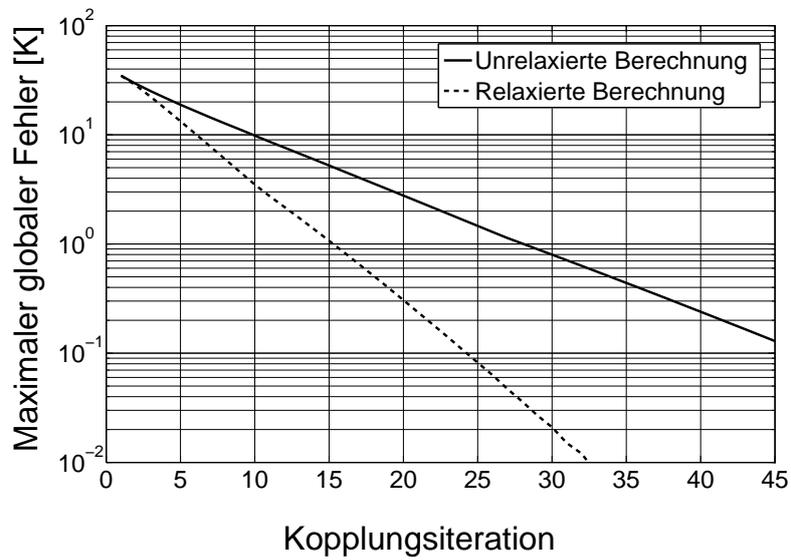


Abbildung 6.6: Maximaler globaler Fehler in der gekoppelten Berechnung über den Kopplungsiterationen.

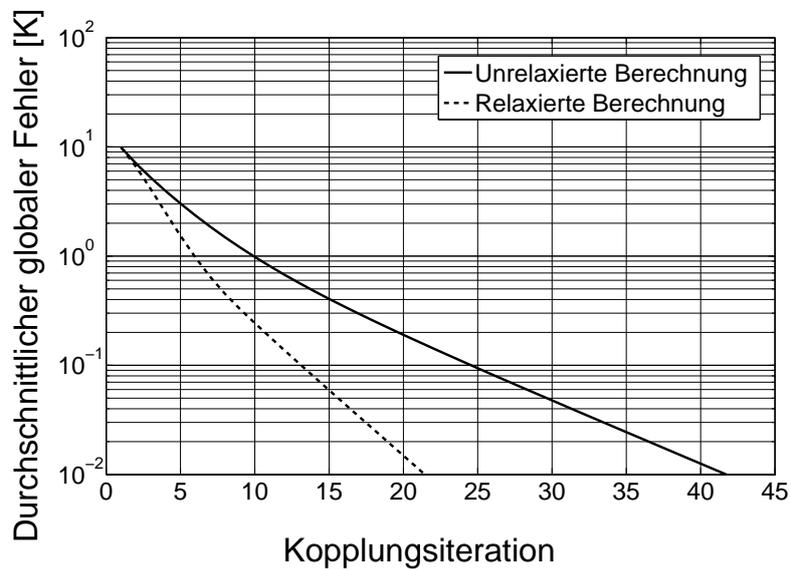


Abbildung 6.7: Durchschnittlicher globaler Fehler in der gekoppelten Berechnung der thermischen Fluid-Struktur-Interaktion über den Kopplungsiterationen.

Zu erkennen ist in beiden Darstellungen die erhöhte Konvergenzordnung der stabilisierten Berechnung. Abhängig eines zu wählenden Konvergenzkriteriums reduziert sich dementsprechend die Anzahl der benötigten Kopplungsiterationen im stabilisierten Fall auf ca. 50% und analog auf den gleichen Prozentsatz der benötigten Rechenzeit. Dies entspricht den Ergebnissen der in Kapitel 5, S. 64 durchgeführten Parameterstudien.

Für die 15. Kopplungsiteration ist in Abbildung 6.8 sowie in Abbildung 6.9 der globale Fehler der stabilisierten und unstabilisierten Berechnung auf den Rändern sowie dem Gebiet des Strömungsfelds aufgetragen. Zu erkennen ist der deutlich reduzierte Fehler in allen Bereich des Modells in der stabilisierten Berechnung.

In Abbildung 6.10 sind die in der entsprechenden Iteration aufbrachten Relaxationsfaktoren auf den Rändern des Strömungsgebietes dargestellt. Die größten Werte der Relaxationsfaktoren liegen dabei erwartungsgemäß in den Bereichen der höchsten globalen Fehlers. In Bereichen, in denen bereits nahezu das Endergebnis erreicht ist, liegen die Relaxationsfaktoren in der Nähe des für die Berechnung neutralen Wertes 1.

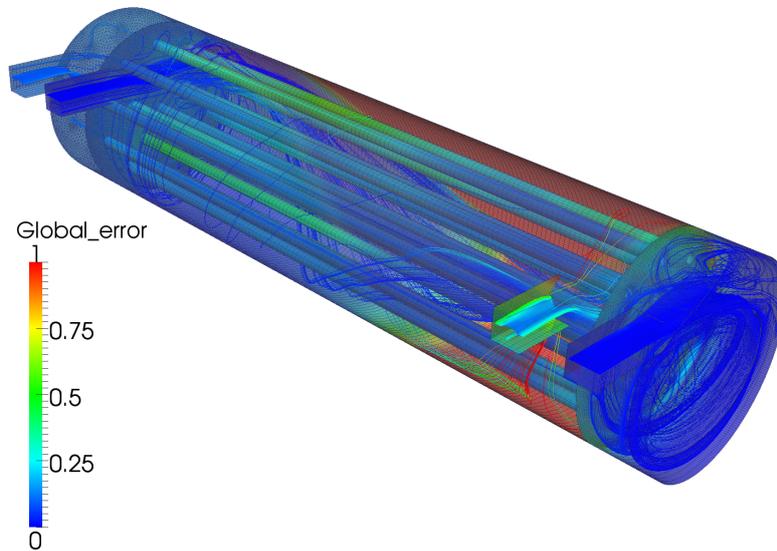


Abbildung 6.8: Globaler Fehler der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der unstabilisierten Berechnung.

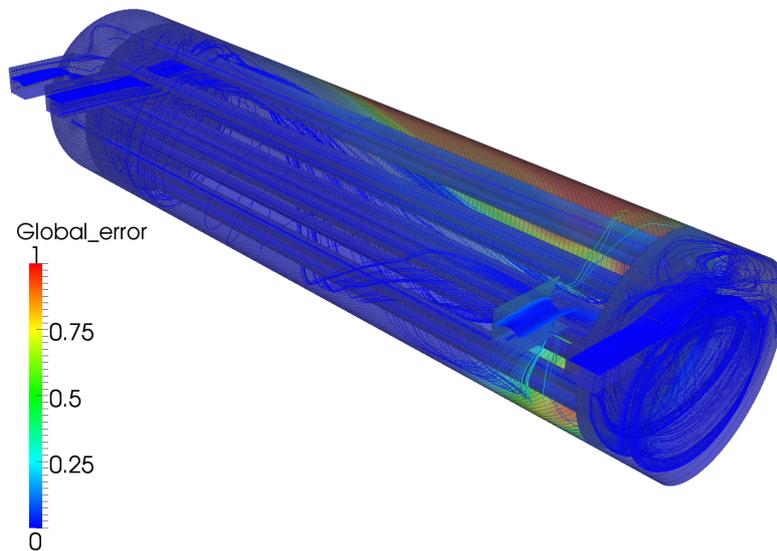


Abbildung 6.9: Globaler Fehler der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der stabilisierten Berechnung.

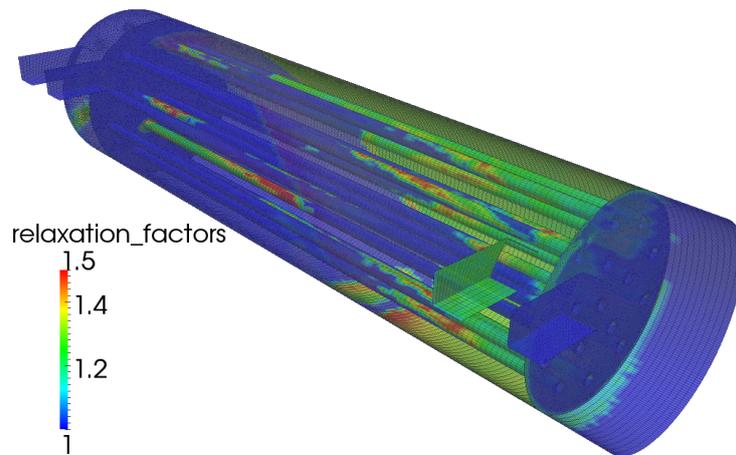


Abbildung 6.10: Auf die Fluidberechnung der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der stabilisierten Berechnung aufgebrauchte Relaxationsfaktoren.

6.2 Gekoppelte Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse

6.2.1 Problemstellung

Die Problemstellung der gekoppelten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse wird durch das Modell des Abgastrakts (Abbildung 6.11) eines turboaufgeladenen Verbrennungsmotors gebildet. In diesem befinden sich zwei Turbolader.

Zur Bewertung des Schwingungsverhaltens und als Basis für Lebensdaueranalysen müssen die Eigenschwingformen des Abgastrakts bestimmt und eine Frequenzantwortanalyse durchgeführt werden, um die schwingungsinduzierten Spannungen bestimmen zu können. Die Schwingungen des Abgastrakts bewirken räumliche, rotatorische Verschiebungen der Turboladerwelle. Diese können in parallel und senkrecht zu der Drehachse der Welle wirkende Anteile aufgeteilt werden. Zweitens bewirken durch die somit entstehende erzwungene Präzession der im Betrieb hochfrequent drehenden Turboladerwelle Kreiselmomente, die wiederum das Schwingverhalten des Abgastrakts beeinflussen. Der Abgastrakt besteht im betrachteten Fall aus Stahl mit bauteilabhängig variierenden Wandstärken von einem Millimeter am Endrohr bis zu drei Millimetern an den Krümmern. Die Lagerung des Modells ist aus Federelementen mit einer Federkonstante von $500 \frac{N}{mm}$ in allen drei Raumrichtungen aufgebaut. Die Schwingungskopplung des

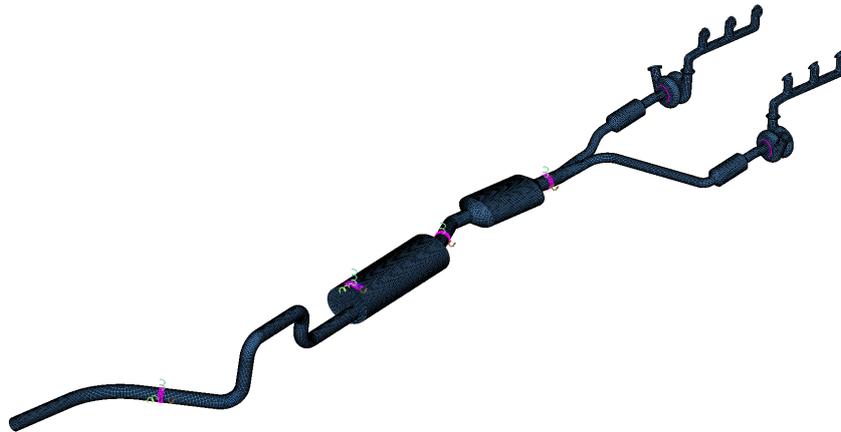


Abbildung 6.11: Modell des in der gekoppelten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse berechnenden Abgastraktes.

vorderen und hinteren Bereichs des realen Abgastrakts durch das sogenannte Flexrohr wird für die vorgestellte Analyse durch die isolierte Betrachtung des vorderen Bereichs bewerkstelligt.

Im betrachteten Lastfall laufen sowohl Motor als auch Turbolader bei Volllast. Die Anregungen, die der Motor in den Abgastrakt an den Krümmern einkoppelt (vgl. Abbildung 6.13) sind vereinfachte Messwerte eines realen Motors für eine Drehzahl von $6000 \frac{1}{min}$. Die Turbolader laufen bei einer Drehzahl von $2 \cdot 10^5 \frac{1}{min}$. Das Schwingungsverhalten des Motors, der als steif betrachtet wird, wird in dem Modell nicht durch Rückkopplungen aus dem Abgastrakt beeinflusst.

Die Frequenzganganalyse wird mithilfe des FE-basierten Programms ABAQUS[®] ([48]) in der Programmversion 6.11 durchgeführt. Das Modell besteht aus 24738 linearen Schalelementen. In der Berechnung werden die Eigenschwingformen des Abgastraktes von 0 bis 400Hz nach dem Lanczos Verfahren berechnet. Diese werden in einer nachgelagerten Frequenzantwortanalyse durch die in Abbildung 6.13 dargestellten Auslenkungen im Bereich von 50 bis 200Hz an den Krümmern angeregt. Zusätzliche Anregungen entstehen durch die Einkopplung der Turboladerreaktionsmomente im Lagerungspunkt der Turboladerwellen. Als Randbedingungen für die Turbolader-Reaktionsmomentanalyse werden frequenzabhängig die Verdrehungen der Turboladerwellen sowie die zugehörigen Phasenwinkel in Schritten von 1.5Hz ausgegeben. Abbildung 6.12 zeigt den Ablauf der gekoppelten Berechnung.

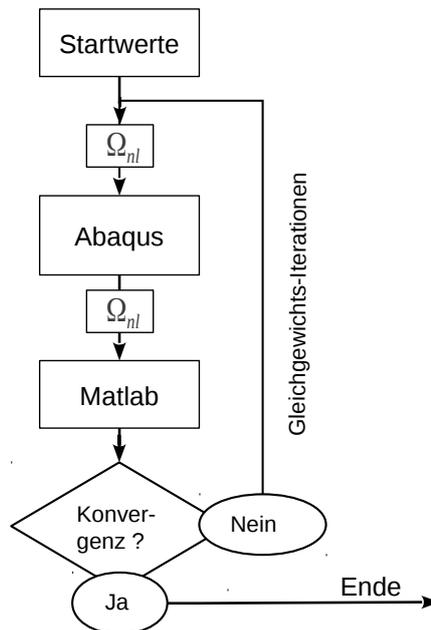


Abbildung 6.12: Ablaufdiagramm der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung.

Die Reaktionsmomentanalyse wird mithilfe des Programms MATLAB[®] ([30]) in der Programmversion R2010a durchgeführt. Darin ist ein analytisches Modell der Turbolader auf Basis der Formeln zur Kreiselmomentenberechnung aufgebaut. Lager- und Strukturdämpfungen sind in dem Modell ebenfalls berücksichtigt. Abhängig der aus der Frequenzganganalyse übergebenen frequenzabhängigen, rotatorischen Auslenkungen der Wellen werden die entsprechenden Reaktionsmomente sowie die zugehörigen Phasenwinkel berechnet und ausgegeben.

Aus den drei übergebenen rotatorischen Verschiebungen je Turbolader inklusive der zugehörigen Phasenwinkel für jede ausgegebene Frequenz ergeben sich 1200 gekoppelte Ergebnisgrößen in der Berechnung.

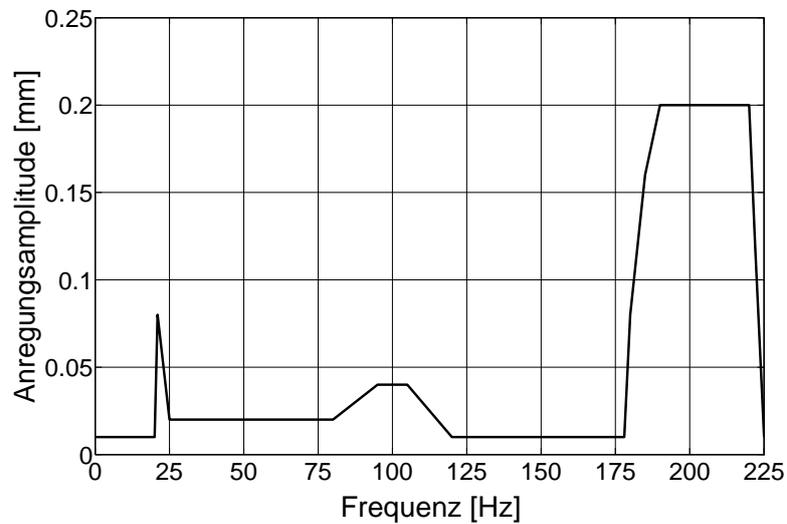


Abbildung 6.13: Anregungskurve der aufgebracht Verschiebungen an den Krümmerankopplungen zum Motor.

6.2.2 Ergebnisse

Der Vergleich der Berechnungsergebnisse zwischen stabilisierter und unstabiler gekoppelter Berechnung zeigt bis zur numerischen Genauigkeit gleiche Ergebnisse. In Abbildung 6.14 sind die Ergebnisse aus unstabiler (links im Bild) und stabiler (rechts im Bild) Analyse der schwingungsinduzierten Spannung an der Krümmung hinter dem rechten Turbolader in Fahrzeugrichtung vergleichend dargestellt. In den Spannungswerten lassen sich dabei keine Unterschiede feststellen. Die Auswirkungen der Einbeziehung der Turboladerreaktionsmomente sind in Abbildung 6.15 erkennbar. Darin sind die Ergebnisse der ungekoppelten (linker Bildbereich) und der gekoppelten (rechter Bildbereich) Berechnung vergleichend dargestellt. Die Spannungswerte weichen deutlich voneinander ab.

Im berechneten Modell kommen sowohl alternierende sowie asymptotische Ergebnisverläufe in den übergebenen Ergebnissen parallel vor. In beiden Fällen bewirkt der eingesetzte gemischt linear-nichtlineare Stabilisierungsalgorithmus eine beschleunigte Auffindung des Endergebnisses der gekoppelten Berechnung.

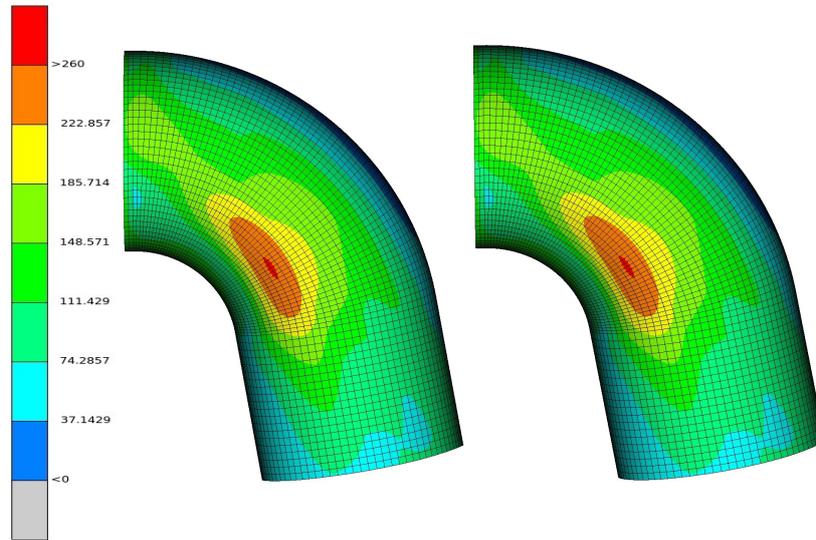


Abbildung 6.14: Spannungen ($[N/mm^2]$) aus unstabilisierter (links) und stabilisierter Berechnung (rechts) bei 113Hz.

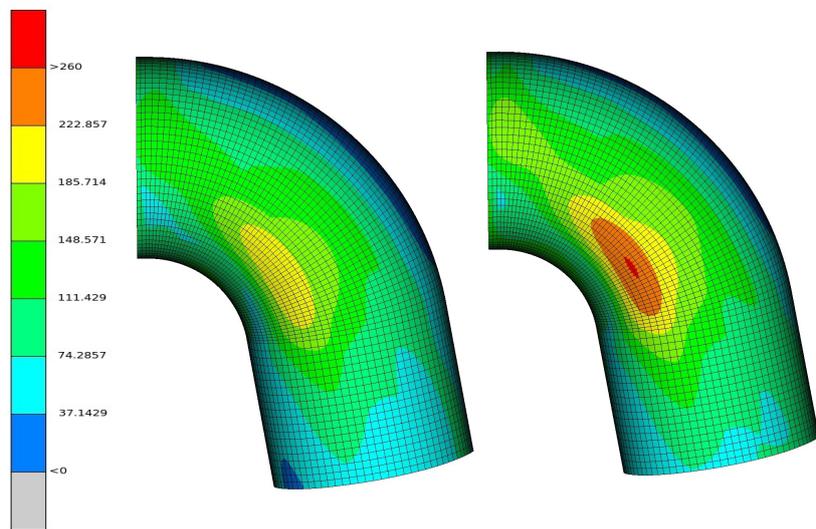


Abbildung 6.15: Spannungen ($[N/mm^2]$) aus ungekoppelter (links) und gekoppelter Berechnung (rechts) bei 113Hz.

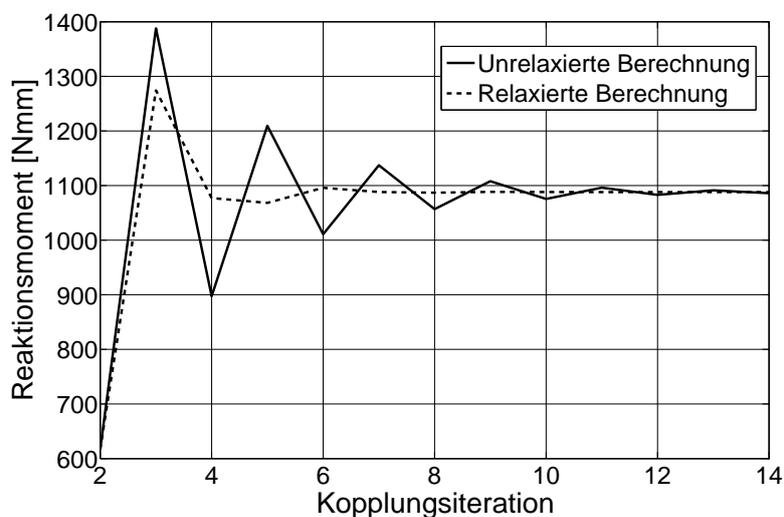


Abbildung 6.16: Ergebnisverlauf der Turbolader-Reaktionsmomente aus der stabilisierten und unstabilierten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse bei 81Hz.

In Abbildung 6.16 ist der Verlauf der Ergebnisse für die Turboladerreaktionsmomente über den Kopplungsiterationen bei einer Frequenz von 81Hz für den linken Turbolader in Fahrzeuginnenrichtung vergleichend zwischen stabilisierter und unstabiler Berechnung dargestellt. Der Werteverlauf ist in beiden Fällen alternierend. Im stabilisierten Fall konvergiert die Berechnung deutlich schneller zum Endergebnis. In Abbildung 6.17 ist für den gleichen Turbolader der Reaktionsmomentenverlauf bei einer Frequenz von 83Hz ebenfalls vergleichend zwischen stabilisierter und unstabiler Analyse über den Kopplungsiterationen dargestellt. Aufgrund der geringen Anzahl der notwendigen Iterationen bewirkt die Stabilisierung nur einen geringfügig beschleunigten Ergebnisverlauf. Dieses Verhalten ist aus den Kalibrierungsberechnungen in Kapitel 5 herleitbar. Darin wurde bei der Auswahl einer geeigneten Parametrisierung besonderes Gewicht auf die Stabilisierung und Beschleunigung von Analysen mit einer hohen Anzahl notwendiger Kopplungsiterationen gelegt. Die Beschleunigung bereits ohnehin schnell konvergierender Berechnungen wurde deutlich geringer priorisiert. Zudem kann erst nach erfolgter Charakterisierung der Berechnung nach der zweiten Kopplungsiteration stabilisierend eingegriffen werden.

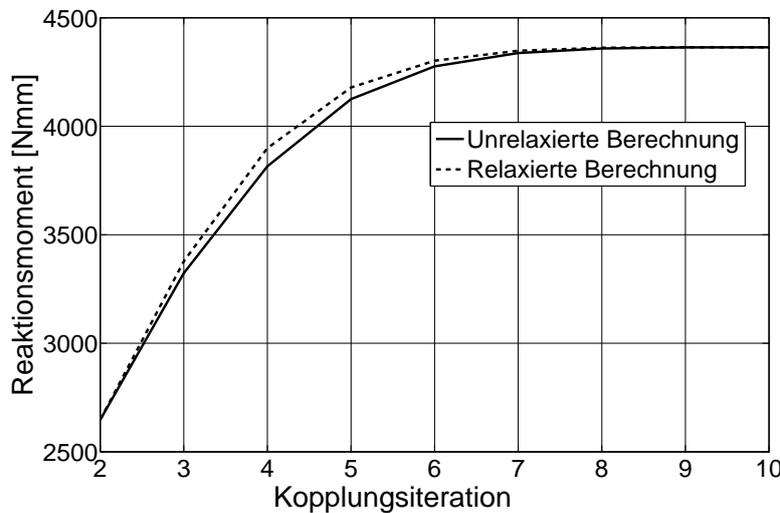


Abbildung 6.17: Ergebnisverlauf der Turbolader-Reaktionsmomente aus der stabilisierten und unstabilierten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse bei 83Hz.

In Abbildung 6.18 ist der Verlauf des durchschnittlichen globalen Fehlers von stabilisierter und unstabiliertes Berechnung dargestellt. Dabei ist dessen deutlich schnellere Reduzierung über den Kopplungsiterationen im stabilisierten Fall zu erkennen. Abhängig eines gewählten Fehlerschrankenwertes zum Erreichen der Konvergenz wird die benötigte Anzahl an Kopplungsiterationen auf 40% reduziert. Die stufenweise Reduzierung des globalen Fehlers im unstabilierten Fall resultiert aus dem angewendeten Gauß-Seidel-Verfahren. Die Veränderung der Reaktionsmomente eines Turboladers und dem damit einhergehenden veränderten Schwingungsverhaltens des Abgastrakts aus einer Iteration beeinflusst den jeweils anderen Turbolader erst in der darauf folgenden Iteration. Derjenige Turbolader mit dem größeren Einfluss auf das Schwingverhalten des Abgastrakts verändert dieses. In der darauf folgenden Iteration verändern sich auch die Ergebnisse der Reaktionsmomente des anderen Turboladers. Da in der Abbildung der gemittelte globale Fehler dargestellt ist, reduziert sich dieser signifikant nur in jeder zweiten durchgeführten Kopplungsiteration. Dieses Verhalten von nach dem Gauß-Seidel-Verfahren durchgeführter, gekoppelter Simulationen wurde auch z.B. in [50] beobachtet. Unter dem Einsatz des entwickelten adaptiven Relaxationsalgorithmus reduziert sich dieser Effekt deutlich durch die entsprechende stabilisierungsbedingte Modifikation der übergebenen Ergebniswerte.

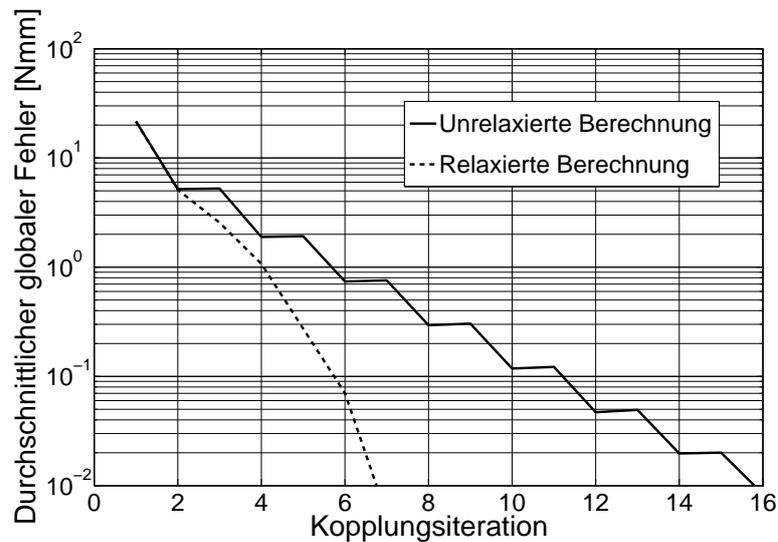


Abbildung 6.18: Durchschnittlicher, über alle Elemente des Ergebnisvektors gemittelter globaler Fehler in der Berechnung der gekoppelten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse über den Kopplungsiterationen.

6.3 Bewertung der Ergebnisse

Die verwendeten Verifikationsproblemstellungen beinhalten sowohl unterschiedliche Berechnungsverfahren, als auch physikalische Problemstellungen. Dementsprechend unterscheiden sich die in den Programmen verwendeten Gleichungen, die Anzahl der gekoppelten Freiheitsgrade, die Kondition der Problemstellungen sowie die Verläufe der Näherungslösungen voneinander. Der in den Berechnungen eingesetzte gemischt lineare adaptive Relaxationsalgorithmus zeigt dabei entsprechend der Auslegung in Kapitel 4 und 5 gleichermaßen positiven Einfluss auf den Berechnungsablauf ohne spezielle Einstellungen für die jeweilige Problemstellung zu benötigen. Das Ziel dieser Arbeit, ein Prinzip zur adaptiven Relaxation zu entwickeln, das unabhängig von

- der Art der gekoppelten Gleichungssysteme bzw. Berechnungsprogramme
- der Anzahl der gekoppelten Ergebniswerte zwischen den gekoppelten Berechnungen
- Einstellungen und damit Kenntnissen des Anwenders

arbeitet, und die benötigten Iterationen bis zum Erreichen des Endergebnisses einer gekoppelten Berechnung signifikant reduziert, wird nach den vorgestellten Ergebnissen als erreicht angesehen.

7 Schlussfolgerungen und Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung einer generell einsetzbaren Methode zur Stabilisierung und Beschleunigung eng gekoppelter partitionierter Berechnungen um die benötigten Soft- und Hardwareressourcen zu verringern. Hierdurch sollte die Wirtschaftlichkeit und Einsetzbarkeit dieser Berechnungsart gesteigert werden, ohne die erreichte Ergebnisgüte zu reduzieren. Der Einsatz der Methode sollte generell möglich sein und keine problemstellungsspezifischen Einstellungen erfordern. Beschränkungen hinsichtlich gekoppelt betrachteter Problemstellungen oder der maximalen Anzahl gekoppelter Ergebnisgrößen zwischen den gekoppelten Programmen sollten nicht vorhanden sein. Auch durfte der Einsatz der Methodik keine Anforderungen an die zu koppelnden Programme stellen, die über diejenigen Anforderungen, die zur Kopplung benötigt werden, hinausgehen.

Zu diesem Zweck wurde ein Verfahren zur Gewinnung von Informationen über die Eigenschaften konkreter partitionierter Multiphysikanalysen aus den in der Simulation übergebenen Daten während der Laufzeit der Berechnung entwickelt. Aus der klassischen Schwingungslehre wurde ein Prinzip abgeleitet, das das bekannte statische Relaxationsverfahren um die automatisierte, adaptive Einstellung der Relaxationsfaktoren erweitert. Auf diesem Prinzip aufbauende Algorithmen wurden entwickelt und in einem erarbeiteten Kopplungsprogramm implementiert. Anhand von durchgeführten Berechnungen konnten die aufgebauten Algorithmen parametrisiert und die Effektivität des Prinzips verifiziert werden.

Dabei ergab sich, dass alle untersuchten, auf dem entwickelten Prinzip zur adaptiven Relaxation basierenden Algorithmen, abhängig von der gewählten Parametrisierung, zur Stabilisierung und Beschleunigung partitionierter Multiphysikanalysen geeignet sind. Die Auswahl der Ansatzfunktionen für die Aufstellung konkreter Algorithmen hat entscheidenden Einfluss auf deren generelle Einsetzbarkeit. Die Kombination von linearen und nichtlinearen Ansatzfunktionen brachte die effektivsten Ergebnisse in den durchgeführ-

ten Testberechnungen. Keine der Berechnungen wurde negativ beeinflusst. Die Verringerung der Anzahl benötigter Kopplungsiterationen im Vergleich zur unstabilierten Berechnung betrug mit diesem kombiniert linearen-nichtlinearen Algorithmus zwischen 20% und 99%. Durchschnittlich wurden ca. 50% der Rechenzeit abhängig der geforderten Ergebnisgenauigkeit eingespart.

In den Verifikationsberechnungen anhand von Modellen unterschiedlicher, praxisrelevanter physikalischer Effekte und Modellgrößen betrug die Einsparung, ohne Einstellungen für den Algorithmus vorzunehmen, zwischen 50 und 60% der benötigten Rechenzeit. Dabei zeigte der entwickelte Algorithmus die größte Effizienzsteigerung bei gekoppelten Berechnungen mit schlechtem Konvergenzverhalten und dementsprechend vielen Kopplungsiterationen bis zum Erreichen von Konvergenz. Der absolute Aufwand der gekoppelten Berechnung, der durch den Einsatz des Algorithmus eingespart werden kann, ist entsprechend hoch.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass das entwickelte Prinzip zur adaptiven Relaxation partitionierter Multiphysikanalysen den gestellten Anforderungen an ein universell einsetzbares Verfahren entspricht und einen wesentlichen Beitrag zur Wirtschaftlichkeitssteigerung von eng gekoppelten partitionierten Multiphysikberechnungen leisten kann.

Auf Basis der erreichten Ergebnisse lassen sich durch entsprechende Untersuchungen zur geeigneten Parametrisierung auch gekoppelte Berechnungen mit mehr als zwei eingebundenen Programmen stabilisieren. Durch Anpassung oder Erweiterung der vorgestellten Ansatzfunktionen lassen sich eventuell weitere Effizienzgewinne erreichen. Durch entsprechende Parameterstudien kann das erarbeitete adaptive Relaxationsverfahren auch auf Berechnungen nach dem Jacobi-Verfahren ausgeweitet werden. Die Kombination des Verfahrens mit Mehrgittermethoden oder Modellen reduzierter Ordnung kann weitere Effizienzgewinne hervorbringen.

Literaturverzeichnis

- [1] ALLEC, N. ; HASSAN, Z. ; SHANG, L. ; DICK, R. P. ; YANG, R.: ThermalScope: multi-scale thermal analysis for nanometer-scale integrated circuits. In: *Computer-Aided Design, 2008. ICCAD 2008. IEEE/ACM International Conference on*, 2008, S. 603–610
- [2] BLETZINGER, K. U. ; GALLINGER, T. ; KUPZOK, A. ; WUCHNER, R.: Partitioned strategies for optimization on FSI. In: *Proceedings of the European conference on computational fluid dynamics, Delft*, 2006
- [3] BLOM, F. J.: A monolithical fluid-structure interaction algorithm applied to the piston problem. In: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 167 (1998), Nr. 3, S. 369–391
- [4] BRITTON, Chris ; BYE, Peter: *IT Architectures and Middleware: Strategies for Building Large, Integrated Systems*. Pearson Education, 2004. – ISBN 9780132702430
- [5] BURMAN, E. ; FERNANDEZ, M. A.: Stabilized explicit coupling for fluid-structure interaction using Nitsche’s method. In: *Comptes Rendus Mathematique* 345 (2007), Nr. 8, S. 467–472
- [6] CALE, T. S. ; BLOOMFIELD, M. O. ; RICHARDS, D. F. ; JANSEN, K. E. ; GOBBERT, M. K.: Integrated multiscale process simulation. In: *Computational materials science* 23 (2002), Nr. 1, S. 3–14
- [7] CARTER, E. D. ; BAKER, A. J.: Accuracy and stability of a finite element pseudo-compressibility CFD algorithm for incompressible thermal flows. In: *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals* 20 (1991), Nr. 1, S. 1–23
- [8] CAUSIN, P. ; GERBEAU, J. F. ; NOBILE, F.: Added-mass effect in the design of partitioned algorithms for fluid–structure problems. In: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 194 (2005), Nr. 42, S. 4506–4527
- [9] CERVERA, M. ; CODINA, R. ; GALINDO, M.: On the computational efficiency and implementation of block-iterative algorithms for nonlinear coupled problems. In:

- Engineering Computations: Int J for Computer-Aided Engineering* 13 (1996), Nr. 6, S. 4–30
- [10] CHOW, Peter ; KUBOTA, Tetsuyuki ; NAMIKI, Takefumi: A Multilevel-Multigrid Approach to Multiscale Electromagnetic Simulation. In: *International Conference on Computational Science (2)'06*, 2006, S. 34–40
- [11] DAHMEN, W. ; REUSKEN, A.: *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer, 2006
- [12] DEGROOTE, J. ; ANNEREL, S. ; VIERENDEELS, J.: Stability analysis of Gauss-Seidel iterations in a partitioned simulation of fluid-structure interaction. In: *Computers & structures* 88 (2010), Nr. 5-6, S. 263–271
- [13] DEGROOTE, J. ; BATHE, K.J. ; VIERENDEELS, J.: Performance of a new partitioned procedure versus a monolithic procedure in fluid-structure interaction. In: *Computers & Structures* 87 (2009), Nr. 11-12, S. 793–801
- [14] FE, THESEUS: *User Guide*. 2012
- [15] FELIPPA, C. A. ; PARK, K. C. ; FARHAT, C.: Partitioned analysis of coupled mechanical systems. In: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 190 (2001), Nr. 24-25, S. 3247–3270
- [16] FERNANDEZ, M. A. ; MOUBACHIR, M.: A Newton method using exact Jacobians for solving fluid–structure coupling. In: *Computers & Structures* 83 (2005), Nr. 2, S. 127–142
- [17] FOUNDATION, OpenFoam: *OpenFOAM User Guide Version 2.1.1*. 2012
- [18] FÖRSTER, C.: Robust methods for fluid-structure interaction with stabilised finite elements. (2007)
- [19] FÖRSTER, C. ; WALL, W. A. ; RAMM, E.: On the geometric conservation law in transient flow calculations on deforming domains. In: *International journal for numerical methods in fluids* 50 (2006), Nr. 12, S. 1369–1379
- [20] GALLINGER, T. ; BLETZINGER, K. U.: Comparison of algorithms for strongly coupled partitioned fluid-structure interaction - efficiency versus simplicity. (2010)
- [21] GALLINGER, T. G. u. a.: *Effiziente Algorithmen zur partitionierten Lösung stark gekoppelter Probleme der Fluid-Struktur-Wechselwirkung*. Shaker, 2010
- [22] GERBEAU, J. F. ; VIDRASCU, M. u. a.: A quasi-Newton algorithm based on a reduced model for fluid-structure interaction problems in blood flows. (2003)
- [23] HEIL, M.: An efficient solver for the fully coupled solution of large-displacement fluid–structure interaction problems. In: *Computer Methods in Applied Mechanics*

- and Engineering* 193 (2004), Nr. 1, S. 1–23
- [24] HEIL, M. ; HAZEL, A.: oomph-lib – An Object-Oriented Multi-Physics Finite-Element Library. In: *Fluid-Structure Interaction* (2006), S. 19–49
- [25] KOLLMANNBERGER, S.: *ALE-type and fixed grid fluid-structure interaction involving the p-version of the Finite Element Method*, Universitätsbibliothek der TU München, Diss., 2010
- [26] KÜTTLER, U. ; WALL, W. A.: Fixed-point fluid–structure interaction solvers with dynamic relaxation. In: *Computational Mechanics* 43 (2008), Nr. 1, S. 61–72
- [27] LE TALLEC, P. ; MOURO, J.: Fluid structure interaction with large structural displacements. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190 (2001), Nr. 24, S. 3039–3067
- [28] LIPPOLD, F.: Zur Simulation von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen mit flexiblen Kopplungsverfahren. (2010)
- [29] LÖHNER, R. ; CEBRAL, J. ; YANG, C. ; BAUM, J. ; MESTREAU, E. ; SOTO, O.: Extending the Range and Applicability of the Loose Coupling Approach for FSI Simulations. In: *Fluid-Structure Interaction* (2006), S. 82–100
- [30] MATHWORKS, The: *R2010a Documentation*. 2010
- [31] MATTHIES, H. G. ; STEINDORF, J.: Partitioned but strongly coupled iteration schemes for nonlinear fluid–structure interaction. In: *Computers & structures* 80 (2002), Nr. 27, S. 1991–1999
- [32] MATTHIES, H. G. ; STEINDORF, J.: Partitioned strong coupling algorithms for fluid–structure interaction. In: *Computers & structures* 81 (2003), Nr. 8, S. 805–812
- [33] MODELISAR: *Functional Mock-up Interface for Model Exchange Document Version 1.0*. 2010
- [34] MOK, D. P.: Partitionierte Lösungsansätze in der Strukturmechanik und der Fluid-Struktur-Interaktion. (2001)
- [35] MORTON, S. A. ; MELVILLE, R. B. ; VISBAL, M. R.: Accuracy and coupling issues of aeroelastic Navier-Stokes solutions on deforming meshes. In: *AIAA Paper-97-1085* (1997)
- [36] PHILLIPS, George M. ; TAYLOR, Peter J.: *Theory and Applications of Numerical Analysis*. Academic Press, 1996. – ISBN 9780125535601
- [37] PIPERNO, S. ; FARHAT, C.: Design of efficient partitioned procedures for the transient solution of aeroelastic problems. In: *Fluid-structure interaction, Innov. Tech. Ser*

- [38] PUDER, Arno ; RÖMER, Kay ; PILHOFER, Frank: *Distributed Systems Architecture: A Middleware Approach*. Elsevier, 2005. – ISBN 9781558606487
- [39] RABACK, P. ; RUOKOLAINEN, J. ; LYLÄ, M. ; JÄRVINEN, E.: Fluid-structure interaction boundary conditions by artificial compressibility. In: *ECCOMAS CFD* Bd. 2001, 2001
- [40] RICHTER, T.: Numerical Methods for Fluid-Structure Interaction Problems. (2010)
- [41] ROGERS, S. E. ; KWAK, D. ; KAUL, U.: On the accuracy of the pseudocompressibility method in solving the incompressible Navier-Stokes equations. In: *Applied mathematical modelling* 11 (1987), Nr. 1, S. 35–44
- [42] SAAD, Yousef: *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2003. – ISBN 9780898715347
- [43] SCAI, Fraunhofer: *MpCCI 4.2.1-1 Documentation*. 2012
- [44] SCHEVEN, M. von: *Effiziente Algorithmen für die Fluid-Struktur-Wechselwirkung*. Inst. für Baustatik und Baudynamik, 2009
- [45] SCHÄFER, M. ; HECK, M. ; YIGIT, S.: An implicit partitioned method for the numerical simulation of fluid-structure interaction. In: *Fluid-structure interaction* (2006), S. 171–194
- [46] SCHÄFER, M. ; LANGE, H. ; HECK, M.: Implicit Partitioned Fluid-Structure Interaction Coupling. In: *Proceedings of 1er Colloque du GDR Interactions Fluide-Structure*, 2005, S. 31–38
- [47] SEBAH, P. ; GOURDON, X.: *Newton's method and high order iterations*. Technical report, 2001. <http://numbers.computation.free.fr/Constants/Algorithms/newton.html>, 2001
- [48] SIMULIA, DOCS: *ABAQUS 6.11 Documentation*. 2011
- [49] STEINDORF, J.: *Partitionierte Verfahren für Probleme der Fluid-Struktur-Wechselwirkung*, Mechanik-Zentrum, Diss., 2002
- [50] TEICHELHANN, Gunnar B.: *Dynamische Iteration zur effizienten numerischen Behandlung inelastischer Materialien mit Anwendung auf Formgedächtnislegierungen*. Hieronymus, 2008. – ISBN 9783897913813
- [51] TEZDUYAR, T. E.: Finite element methods for fluid dynamics with moving boundaries and interfaces. In: *Encyclopedia of computational mechanics* 3 (2004), S. 545–577
- [52] VIERENDEELS, J.: Implicit coupling of partitioned fluid-structure interaction solvers using reduced-order models. In: *Fluid-Structure Interaction* (2006), S. 1–18

- [53] VIERENDEELS, J. ; LANOYE, L. ; DEGROOTE, J. ; VERDONCK, P.: Implicit coupling of partitioned fluid-structure interaction problems with reduced order models. In: *Computers & structures* 85 (2007), Nr. 11-14, S. 970–976
- [54] VORST, Henk A. van d.: *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*. Cambridge University Press, 2003. – ISBN 9780521818285
- [55] WALL, W. A.: Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten Finiten Elementen. (2000)
- [56] WANG, C. Y. ; SRINIVASAN, V.: Computational battery dynamics (CBD)–electrochemical/thermal coupled modeling and multi-scale modeling. In: *Journal of power sources* 110 (2002), Nr. 2, S. 364–376
- [57] WIECHERT, Lena ; COMERFORD, Andrew ; RAUSCH, Sophie ; WALL, Wolfgang: Advanced Multi-scale Modelling of the Respiratory System. In: KLAAS, Michael (Hrsg.) ; KOCH, Edmund (Hrsg.) ; SCHRÖDER, Wolfgang (Hrsg.): *Fundamental Medical and Engineering Investigations on Protective Artificial Respiration* Bd. 116. Springer Berlin / Heidelberg, 2011. – ISBN 978-3-642-20325-1, S. 1–32
- [58] YOUNG, David M.: *Iterative Solution of Large Linear Systems*. Courier Dover Publications, 2003. – ISBN 9780486425481

Abbildungsverzeichnis

2.1	Benötigte Kopplungsiterationen in Abhängigkeit des Ausmaßes der Feldinteraktionen durch veränderte Fluidichte in einer Fluid-Strukturinteraktionsberechnung anhand des Modells "FSI mit senkrechter Initialposition" aus Kapitel 5.	10
2.2	Schema einer nach dem Jacobi Verfahren durchgeführten gekoppelten Simulation.	14
2.3	Schema einer nach dem Gauß-Seidel-Verfahren durchgeführten gekoppelten Simulation.	16
2.4	Kombiniertes Schema einer schwach (nur schwarze Elemente) bzw. eng (um graue Elemente erweitert) gekoppelten Berechnung nach dem Gauß-Seidel-Verfahren.	18
2.5	Ablaufschema einer um Gleichgewichtsiterationen erweiterten gekoppelten Berechnung nach dem Gauß-Seidel-Verfahren.	19
2.6	Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung.	25
2.7	Ansatzpunkt von Stabilisierungsverfahren in der partitionierten Multiphysiksimulation am Beispiel einer gekoppelten Simulation nach der Gauß-Seidel-Methode.	28
2.8	Relaxiertes Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung.	30
2.9	Benötigte Iterationen bis zum Erreichen der Konvergenz über dem angewendeten statischen Relaxationsfaktor für das Modell "lineare Wärmeleitungs- Wärmestrahlungskopplung" aus Kapitel 5.	30
2.10	Fixpunktiterationsverfahren zur Gleichungslösung unter Einsatz eines Extrapolationsverfahrens.	33
3.1	Alternierend konvergenter (schwarz dargestellt) und divergenter (grau dargestellt) Ergebnisverlauf einer gekoppelten Berechnung.	40
3.2	Schematisch dargestellter asymptotisch konvergenter (schwarz dargestellt) und divergenter (grau dargestellt) Werteverlauf.	41
4.1	Normierter Ergebnisverlauf des Modells "FSI mit senkrechter Initialposition" aus Kapitel 5 für eine ausgewählte Parametrisierung.	48
4.2	Normierter Ergebnisverlauf des Modells "FSI mit waagrechter Initialposition" aus Kapitel 5 für eine ausgewählte Parametrisierung.	49
4.3	Linearen Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.	56

4.4	Nichtlineare Ansatzfunktion für die ω_{i-1} -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.	57
4.5	Lineare Ansatzfunktion für die K -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.	58
4.6	Nichtlineare Ansatzfunktion für die K -Abhängigkeit des adaptiven Relaxationsalgorithmus.	59
4.7	Linearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus	60
4.8	Nichtlinearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus.	62
4.9	Gemischt linear-nichtlinearer adaptiver Stabilisierungsalgorithmus.	63
5.1	Testmodell "Nichtlineare eindimensionale gekoppelte Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung".	67
5.2	Ergebnisverlauf des durch Abstrahlung abgegebenen Wärmestroms des linearen sowie nichtlinearen Modells Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B.	70
5.3	Testmodell "FSI mit nahezu waagrechter Initialposition".	71
5.4	Ergebnisverlauf des durch den Fluiddruck hervorgerufenen Moments auf den Lagerpunkt der Platte im Modell Fluid-Struktur Interaktion mit nahezu waagrechter Initialposition mit $\rho = 140 \frac{kg}{m^3}$	72
5.5	Testmodell "FSI mit senkrechter Initialposition".	73
5.6	Kubisch interpolierte Antwortfläche einer 2-dimensionalen Parameterstudie.	75
5.7	Kubisch zwischen den Zielwerten der Parameterstudie interpolierte Antwortfläche einer zweidimensionalen Parameterstudie nach zweifacher Anwendung der Glättungsfunktion.	77
5.8	Schematische Darstellung der auf die Ergebnisse einer zweidimensionalen Parameterstudie angewendeten Glättungsfunktion.	77
5.9	Relative Rechenzeit unter Einsatz der optimal parametrisierten adaptiven Stabilisierungsalgorithmen.	80
6.1	Modell des gekoppelt zu berechnenden Wärmetauschers. Die Elemente der Struktur sind ausgeblendet.	84
6.2	Ablaufdiagramm der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung.	85
6.3	Ungekoppelt berechnetes Ergebnis der Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher.	85
6.4	Zwischenergebnis der gekoppelt berechneten Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher nach zwei Iterationen.	86
6.5	Endergebnis der gekoppelt berechneten Strömungstemperatur des Verifikationsmodells Wärmetauscher.	86
6.6	Maximaler globaler Fehler in der gekoppelten Berechnung über den Kopplungsiterationen.	87

6.7	Durchschnittlicher globaler Fehler in der gekoppelten Berechnung der thermischen Fluid-Struktur-Interaktion über den Kopplungsiterationen.	87
6.8	Globaler Fehler der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der un- stabilisierten Berechnung.	89
6.9	Globaler Fehler der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der stabi- lisierten Berechnung.	89
6.10	Auf die Fluidberechnung der Temperaturwerte in Kopplungsiteration 15 der stabilisierten Berechnung aufgebrauchte Relaxationsfaktoren.	90
6.11	Modell des in der gekoppelten Frequenzgang- und Reaktionsmomentana- lyse berechnenden Abgastraktes.	91
6.12	Ablaufdiagramm der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung.	92
6.13	Anregungskurve der aufgebrauchten Verschiebungen an den Krümmeran- kopplungen zum Motor.	93
6.14	Spannungen ($[N/mm^2]$) aus unstabilerter (links) und stabilerter Be- rechnung (rechts) bei 113Hz.	94
6.15	Spannungen ($[N/mm^2]$) aus ungekoppelter (links) und gekoppelter Be- rechnung (rechts) bei 113Hz.	94
6.16	Turbolader-Reaktionsmomente aus der stabilisierten und unstabilierten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse bei 81Hz.	95
6.17	Turbolader-Reaktionsmomente aus der stabilisierten und unstabilierten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse bei 83Hz.	96
6.18	Durchschnittlicher, über alle Elemente des Ergebnisvektors gemittelter globaler Fehler in der Berechnung der gekoppelten Frequenzgang- und Reaktionsmomentanalyse über den Kopplungsiterationen.	97

Tabellenverzeichnis

5.1	Randbedingungen des Modells Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung.	68
5.2	Randbedingungen für den Strahlungskoeffizienten des Modells nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung A.	68
5.3	Randbedingungen für den Strahlungskoeffizienten des Modells nichtlineare Wärmeleitungs-Wärmestrahlungsberechnung B.	69
5.4	Konfiguration der Parameterstudien zur Parametrisierung der adaptiven Stabilisierungsalgorithmen.	74
5.5	Aus der Auswertung der Parameterstudien als optimal gefundene Parameterkombinationen für die untersuchten Algorithmen.	79
6.1	Materialkennwerte des in der thermischen Fluid-Struktur-Interaktionsberechnung verwendeten Fluides bei der Referenztemperatur 300 K.	83

Anhang

Entwickeltes Kopplungsprogramm

Zur Verifikation und Kalibrierung des erarbeiteten adaptiven Relaxationsverfahrens und der darauf aufbauenden Algorithmen wurde ein Kopplungsprogramm entwickelt. Der grundlegende Aufbau ist im Folgenden beschrieben.

Methodik zur gekoppelten Berechnung

Das Programm arbeitet nach dem partitionierten, eng gekoppelten Verfahren. Zur Lösung der gekoppelt zu berechnenden physikalischen Effekte werden Black-Box Programme eingebunden. Als Kopplungsschema wird das Gauß-Seidel-Verfahren verwendet. Die Ansteuerung der Berechnungsprogramme wird durch Systemaufrufe realisiert. Die zur Kopplung benötigte Übergabe von Ergebniswerten wird durch ASCII-Dateien abgebildet. Die Eigenschaften des entstehenden Verfahrens leiten sich aus den in Kapitel 2 (S. 5 ff.) genannten Grundlagen ab.

Struktureller Aufbau

Das entwickelte Kopplungsprogramm besteht aus einem Hauptprogramm, das in der Kompiliersprache C++ und Schnittstellenskripten, die in der Interpretersprache Perl implementiert sind.

Für das Hauptprogramm werden die berechnungsprogrammspezifischen Dateiformate der Berechnungsergebnisse mithilfe der Schnittstellenskripte in ein definiertes Standard-csv-Format umgewandelt. Durch dieses Vorgehen werden bei Anbindung zusätzlicher Berechnungsprogramme keine Veränderungen bzw. Erweiterungen am eigentlichen Kopplungsprogramm notwendig, das somit ausschließlich auf Daten im csv-Format arbeiten muss. C++ bietet effiziente Klassen zur Durchführung numerischer Berechnungen und

Speicherung spezieller Matrizen und Vektoren. Die Objektorientierung der Programmiersprache erleichtert den Aufbau großer Softwareprojekte, erhöht deren Wartbarkeit und macht eine übersichtliche Quelltextgestaltung möglich. Perl, eine verbreitete Skriptsprache, ist auf Textoperationen in ASCII-formatierten Dateien ausgelegt und hält entsprechende Routinen vor, um den Skriptaufbau effizient durchführen zu können. Der grundlegende Ablauf der gekoppelten Berechnung für eine statische Analyse innerhalb des Hauptprogramms lässt sich in Pseudocode darstellen als:

Prozedur: Gekoppelte Berechnung

Parameter: Liste auszuführender Berechnungsprogramme, Konvergenzkriterium

1. Wiederhole so lange bis Konvergenz erreicht ist:
2. Für jedes der auszuführenden Berechnungsprogramme:
3. Stelle benötigte Daten im csv-Format zur Verfügung
4. Starte Skript zum Transfer der Daten in solverlesbares Format
5. Starte Berechnungsprogramm
6. Starte Skript zum Transfer der Ergebnisse in csv-Format
7. Lese relevante Ergebnisdaten im csv-Format ein
8. Starte Konvergenzprüfung
9. Starte Stabilisierungsoperationen
10. Gehe zu 3.
11. Gehe zu 1.
12. Ende

Über den grundlegenden Ablauf hinaus sind in dem Kopplungsprogramm Funktionen für

- die Datei- bzw. Datenverwaltung
- das Pre- und Postprocessing
- die Berichterstellung
- die Parallelisierung von Berechnungen
- die Speicherung und Laden definierter gekoppelter Berechnungen
- die zeitliche Extrapolation der Ergebnisvektoren
- den Übertrag von Ergebnissen zwischen unterschiedlichen Modelldiskretisierungen

implementiert. Diese Funktionen sind für die in dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen nicht notwendig und werden daher nicht näher beschrieben.

Ankopplung der Berechnungsprogramme

Wie in Abschnitt 2.1.1 (S. 5 ff.) beschrieben, werden die Ergebnisse der eingebundenen Programme in einer gekoppelten Berechnung untereinander ausgetauscht. Anschließend werden die Ergebnisse als Lastvektoren bzw. Randwerte in den Programmen definiert. Diese berechnen davon abhängig die Lösung der in Ihnen definierten Problemstellung. Im Allgemeinen wird die Definition der zu berechnenden Aufgabenstellung für CAE-Berechnungsprogramme durch den Aufbau sogenannter Input-Decks durchgeführt. In diesen sind die Modelldefinition mit ggf. Knotenkoordinaten und Elementen, die zu verwendenden Gleichungen sowie der zu berechnende Lastfall mit entsprechenden Randwerten definiert. Die Randwerte können element- oder knotenspezifisch aufgebracht, die Ergebnisse ebenso wieder ausgegeben werden. Die Input-Decks sind in der Regel nach dem ASCII-Standard formatiert, sodass diese in einem Texteditor oder durch Skriptsprachen wie Perl verändert werden können.

Die Ergebnisse von Berechnungsprogrammen werden in einer gekoppelten Berechnung element- oder knotenspezifisch in eine ASCII-Datei ausgegeben. Sie liegen im Regelfall in einem Format vor, das abhängig des verwendeten Programms ist. Über die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Schnittstellenskripte werden die ausgegebenen Daten in ein definiertes Standard-csv-Format übersetzt. Die Definition des verwendeten Standard-csv-Formats sieht vor, dass eine Zeile der csv-Datei jeweils die Ergebniswerte an einem Element oder Knoten enthält. Am Anfang jeder Zeile steht zunächst eine Identifikationszahl. Diese kann unter anderem eine Knoten- oder Elementnummer darstellen. Im Anschluss daran stehen die berechneten Ergebnisse. Die Identifikationszahlen müssen dabei nicht von 1 ab beginnend und nicht fortlaufend sein. Eine Standard-csv-Datei mit einer Identifikationszahl und zwei übergebenen Ergebniswerten ist dementsprechend folgendermaßen für Beispielwerte aufgebaut:

```
500001 , 43.45 , 23.67
500002 , 42.54 , 23.13
500003 , 42.33 , 22.54
500004 , 45.24 , 23.22
500006 , 45.31 , 23.97 .
```

In dem Berechnungsprogramm, in dem die Werte der csv-Datei als Randwerte aufgebracht werden sollen, wird bei Erstellung des Input-Decks eine Randbedingung des gewünschten Typs definiert. Dies kann z.B. Temperatur, Verschiebung oder Druck abhängig von der betrachteten Problemstellung sein. Die im Standard-csv-Format vorliegenden, aufzubringenden Ergebniswerte werden durch ein weiteres Schnittstellenskript an der Stelle der vorgenommenen Randbedingungsdefinition im benötigten Format des

Berechnungsprogramms eingefügt. Anschließend wird das Berechnungsprogramm mit dem durch das Schnittstellenskript modifizierten Input-Deck ausgeführt.

Das beschriebene Vorgehen geht von deckungsgleichen Diskretisierungen der Modelle in den Berechnungsprogrammen an den Schnittstellen zwischen den berechneten Feldern aus. Sind die Diskretisierungen nicht deckungsgleich, müssen ggf. sogenannte Mapping-Verfahren zum Einsatz kommen. Diese übertragen durch z.B. Interpolationsverfahren die Werte einer Modelldiskretisierung auf eine andere. Da bei dem Mappingprozess verfahrensbedingter Informationsverlust auftritt, wurde in den in dieser Arbeit berechneten Modellen zur Erhaltung der Ergebnispräzision auf die Deckungsgleichheit der Modelldiskretisierungen geachtet.