Projektbeschreibung zum Großprojektantrag für den Parallelrechner T3E des ZIB

Rupert Klein 1,2 und Markus Uhlmann 1

¹Potsdam Institut für Klimafolgenforschung, D-14412 Potsdam ²FB Mathematik & Informatik, Freie Universität Berlin, Konrad Zuse Zentrum für Informationstechnik, Takustr. 7, D-14195 Berlin

(14 Januar 2002)

1. Wissenschaftliche Zielsetzung des Projektes

1.1. Zusammenfassung

Kolmogoroffs Theorie der "Energiekaskade" besagt, daß die auf großen Skalen in eine turbulente Strömung eingespeiste Energie sukzessive auf immer kleinere Strukturen übertragen wird, um letztlich auf den kleinsten Skalen durch Reibung dissipiert zu werden. Eine Dimensionsanalyse für stationäre, homogene, isotrope Turbulenz liefert ein kontinuierliches Geschwindigkeits-Energiespektrum nach dem weithin akzeptierten Gesetz $E(k) \sim k^{-5/3}$. Zufriedenstellende Erklärungen existieren bis heute weder für den Energietransfermechanismus noch für die Details der Energiedissipation auf den kleinsten Längenskalen.

Ein Ensembel skalenseparierter Ereignisse kann ein kontinuierliches Spektrum bilden, wenn die an den Einzelereignissen beteiligten Längenmaße selbst stochastisch sind. Die Einzelereignisse sind dann trotz des kontinuierlichen Spektrums einer Mehrskalenasymptotik zugänglich. Eine solche zeigt, daß lokalisierte, drehungsfreie Geschwindigkeitsstörungen Wirbelstärke aus einem umgebenden Wirbelfeld abziehen und sich zu kleinskaligen, voll wirbelbehafteten Strukturen auswachsen können. Als Arbeitshypothese wird angenommen, daß dieser Mechanismus sowohl den Energietransfer als auch, bei Einschluß der Reibung, die Energiedissipation erklären kann.

Die Ziele dieses Projektes sind, (i) die obige Hypothese anhand direkter numerischer Simulationen zu verifizieren, (ii) Lösungseigenschaften der asymptotischen Mehrskalen-Gleichungen zu untersuchen und (iii) ggfs. die Konsequenzen der Theorie für die Turbulenzmodellierung zu analysieren.

Eine detaillierte Beschreibung dieses Projektes ist dem beigefügten DFG-Antrag auf Gewährung einer Sachbeihilfe (Projektkennzeichnung KL 611/10) zu entnehmen.

1.2. Eigene Vorarbeiten

1.2.1. Asymptotik und Numerik für schlanke Wirbel

Der erste Antragsteller konnte u.a. mit den Arbeiten Ting & Klein (1991); Klein & Majda (1991a,b) beträchtliche Erfahrung in der asymptotischen Mehrskalenanalyse wirbelbehafteter Strömungen sammeln. In diesen Arbeiten wurden verschiedenene Aspekte der Dynamik konzentrierter, schlanker Wirbel in drei Dimensionen untersucht. Die Arbeiten schließen theoretische Herleitungen vereinfachter effektiver Bewegungsgleichungen für schlanke Wirbel und deren mathematische Analyse ein. In Klein (1994) wurde eine neuartige Herleitung der Wirbelfadenbewegungsgleichungen auf der Basis der Wirbeltransportgleichungen vorgestellt. Diese Analyse erlaubte es, wesentliche Korrekturen eines numerischen Verfahrens zur Simulation schlanker Wirbel vorzuschlagen.

Auf der Basis dieser Korrektur war es in Klein & Knio (1995); Knio, Klein & Ting (1995) erstmals möglich, die Wirbelfadenbewegung unter korrekter Berücksichtigung von Wirbelstreckung und Wirbeldiffusion mit Hilfe einer modernen Wirbelelementmethode zu simulieren.

1.2.2. Numerische Verfahren mit asymptotischer Adaptivität (DFG-Projekt KL 611/6-1,2)

Im Projekt DFG KL 611/6-1,2 geht es um die Entwicklung numerischer Verfahren für singuläre Grenzregime der Strömungsmechanik unter Zuhilfenahme asymptotischer Methoden. Dieses Projekt ist Teil eines zusammen mit Prof. Th. Sonar (Hamburg) und Prof. C.-D. Munz (Stuttgart) initiierten DFG Paket-Projekts.

Eine für den vorliegenden Antrag bedeutsame Teilaufgabe dieser Arbeiten ist die Entwicklung asymptotischer Filteroperatoren. Diese erlauben es, aus gegebenen numerischen Daten einer Strömungssimulation ein asymptotisches Regime zu extrahieren. So werden etwa die Mach- oder Froude-Zahl einer Strömung sowie die charakteristischen Längenund Zeitskalen verschiedener Strömungsphänomene dynamisch bestimmt (Grahs (1998); Friedrich, Schröder-Pander & Sonar (1998)). Um diese Aufgabe zu erfüllen, werden Wavelet-Methoden zur Skalenanalyse mit analytischen Kriterien kombiniert, die sich aus asymptotischen Mehrskalentheorien (siehe Klein (1995)) ergeben. Diese Methodik wird in anderen Teilaufgaben des erwähnten Projektpaketes verwertet, um numerische Diskretisierungen dynamisch adaptiv zu steuern, Meister & Sonar (1997).

1.3. Asymptotische Analyse unter Berücksichtigung von Reibungs- und Dissipationseffekten

Eine vorab durchgeführte reibungsfreie asymptotische Analyse stellt nur einen ersten möglichen Ansatz dar, die Interaktion strömungsmechanischer Phänomene über große Skalendifferenzen hinweg zu beschreiben. Eine befriedigende Theorie der Energiekaskade muß auch den Abbruch des Energiespektrums bei kleinsten Skalen durch den Einfluß der Viskosität erfassen. Es ist vorgesehen, für dieses "untere Ende" des Skalenspektrums einen gekoppelten Grenzübergang einzuführen, der den Entwicklungsparameter ϵ an die lokale Reynoldszahl knüpft. Da der gekoppelte Grenzübergang per Konstruktion eine Gleichberechtigung von Reibungs- und Trägheitseffekten zuläßt, sollte auf diese Weise der Übergang zwischen dem rein trägheitsbestimmten Inertialbereich und dem durch Reibung dominierten Ende der Kaskade erfaßbar sein.

Von besonderem Interesse ist in diesem Zusammenhang die Tatsache, daß es sich bei den hier betrachteten Strömungsstrukturen um streng lokalisierte Ereignisse handelt. Die in die Asymptotik einfließende Reynolds-Zahl kann deswegen nur lokale Gültigkeit besitzen. Es folgt, daß Dissipationseffekte nicht bei einer global bestimmbaren festen "Kolmogoroff-Länge" auftreten werden, sondern daß die Dissipationslänge eine inhomogen verteilte statistische Größe sein muß. Diese Beobachtung steht in Übereinstimmung mit theoretischen Überlegungen anderer Wissenschaftler, die auf völlig anderen Denkansätzen beruhen.

1.4. Verifikation der aufgestellten Hypothesen anhand direkter numerischer Simulation

Der Schwerpunkt der Arbeiten wird auf einer gezielten Auswertung direkter numerischer Simulationen liegen. Wohl die überwiegende Anzahl von Studien der Turbulenz auf der Basis direkter numerischer Simulationen konzentriert sich auf die i.a. zeitunabhängige Statistik der berechneten Strömungsfelder. Zeitlich beträchtlich voneinander separierte berechnete Strömungsfelder werden z.B. einer Fourier-Zerlegung unterworfen, um ihre Spektren aufzeichnen zu können, oder es werden einzelne Strömungsstrukturen bei fest-



ABBILDUNG 1. Schema der Konfiguration.

gehaltener Zeit analysiert. Im Gegensatz dazu soll im hier beantragten Projekt besonderes Augenmerk auf die *zeitliche Entwicklung* solcher identifizierbarer Strömungsstrukturen gerichtet werden. Auf diese Weise sollen die Mechanismen aufgezeigt werden, die erst zur Ausbildung dieser Strukturen und damit auch zur Etablierung der mit Ihnen assoziierten Spektren führen.

Von großer Bedeutung für die durchzuführenden Rechnungen ist deshalb eine hohe zeitliche Auflösung der aufgezeichneten Strömungsfelddaten und eine sorgfältige Analyse der gefundenen zeitlichen Abläufe. Nur eine solche gezielte Betrachtung der zeitlichen Entwicklungen wird letztlich die gesuchten Kausalzusammenhänge aufzeigen können.

Die asymptotischen Gleichungen sollen zur gezielten Auswertung der direkten numerischen Simulationsdaten herangezogen werden. Entsprechend der skizzierten Hypothese sollten sich kleinskalige, instabile Lösungsanteile detektieren lassen, die durch das sie umgebende Feld advektiv transportiert werden und die nach hinreichendem Wachstum ihrer Amplituden die nichtlinearen Transportgleichungen mit Quelltermen erfüllen. Die für die Identifikation kleinskaliger Lösungsanteile benötigten Filteroperatoren sollen durch Weiterentwicklung der im DFG-Projektpaket (KL 611/6-1,2) zusammen mit den Kollegen Sonar (Hamburg) und Munz (Stuttgart) konstruierten asymptotischen Filter aufgebaut werden.

Die eigentliche Verifikation der Leithypothese dieses Projekts ergibt sich wie folgt: Zunächst werden solche Filteroperatoren eingesetzt, um kleinskalige, lokalisierte Lösungsanteile aufzufinden. Anschließend werden die Felddaten aus der engeren räumlichen Umgebung dieser Störungen in eine diskrete Approximation der Gleichungen eingesetzt. Sind die auf diese Weise erzeugten Residuen klein, so ist ein wesentliches Indiz für die Gültigkeit der eingangs formulierten Hypothese gefunden.

2. Numerische Methoden

Der maßgebliche numerische Aufwand des gegenwärtigen Projektes besteht in der Erzeugung detaillierter Strömungsdaten durch direkte Simulation (DNS). In geringerem Maße werden auch die o.g. Nachbearbeitungsschritte mittels digitaler Filter informationstechnische Ressourcen beanspruchen; im folgenden werden wir uns jedoch auf die Darstellung der DNS Methode beschränken.

Wir lösen die zeitabhängigen Navier-Stokes Gleichungen für die Bewegung eines inkompressiblen, isothermen Fluides. Das Integrationsgebiet ist begrenzt von zwei parallelen, ebenen Wänden, die im Abstand 2h voneinander stehen und eine unendliche Ausdehnung haben (Abbildung 1). Das Lösungsschema basiert auf dem Verfahren von Kim, Moin & Moser (1987). Wir benutzen eine Formulation der Bewegungsgleichungen in Abhängigkeit der folgenden Variablen: wandnormale Wirbelstärke ω_y , Laplaceoperator angewandt auf die wandnormale Geschwindigkeitskomponente $\varphi = \nabla^2 v$; hiermit wird der Druckterm aus den Gleichungen eliminiert. Die resultierende Gleichung vierter Ordnung für die Variable φ wird zwecks Implementierung der adäquaten Randbedingungen für die Geschwindigkeit v in zwei Gleichungen zweiter Ordnung überführt.

In den beiden Koordinatenrichtungen, welche durch statistische Homogenität des turbulenten Strömungsfeldes gekennzeichnet sind (axiale Richtung und Spannweitenrichtung), werden die Variablen in Fourierreihen entwickelt. In der wandnormalen Richtung führen wir eine Entwicklung mit Tschebycheff Polynomen durch. Unsere Methode ist pseudospektral: die nicht-linearen Konvektionsterme werden im physikalischen Raum berechnet und Transformationen mit Hilfe von *fast Fourier transforms* ausgeführt, wobei die 3/2 Regel zur Vermeidung von *aliasing* Fehlern genutzt wird.

Die Zeitintegration des Systems erfolgt in semi-impliziter Weise mit Hilfe eines Runge-Kutta Schemas dritter Ordnung und impliziter Diskretisierung der Reibungsterme. Folglich ist zu jedem Runge-Kutta Unterschritt und für jede Kombination von Fouriermoden ein einfaches Helmholtzproblem (ω_y) und ein Paar biharmonischer Helmholtzprobleme (φ, v) in wandnormaler Richtung zu lösen. Dies erfolgt mittels einer Tschebyscheff-Tau Methode, welche zu tridiagonalen linearen Gleichungssystemen führt. Der Lösungsalgorithmus ist im folgenden schematisch dargestellt:

$$\begin{cases} \text{for } n = 1 \dots N_{it} \\ \text{for } k = 1 \dots 3 \\ \bullet \text{ berechne } (f_{NL})^{n+(k-1)/3} \text{ pseudo-spektral,} \\ \\ \bullet \begin{cases} \text{löse} \\ \frac{\phi^{n+k/3} - \phi^n}{\Delta t \, \alpha_k} - \frac{1}{Re} \nabla^2 (\phi^{n+k/3}) = (f_{NL})^{n+(k-1)/3}, \quad \alpha_k = \{\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 1\} \\ \\ \text{mittels Galerkin Methode gewichteter Residuen,} \end{cases}$$

$$(2.1)$$

wobei ϕ die beiden Variablen bezeichnet: $\phi = \{\nabla^2(v), \omega_y\}$; und f_{NL} fuer die jeweiligen nicht-linearen Terme steht; Re die Reynoldszahl und Δt der Zeitschritt ist.

3. Parallelisierung des Lösungsverfahrens

Spektrale Verfahren erscheinen wegen der globalen Approximation auf den ersten Blick nicht als ideale Kandidaten für parallele Algorithmen. Bei mehrdimensionalen Problemen lässt sich jedoch im allgemeinen die Entkopplung der Richtungen zur effizienten Verteilung der Arbeit auf verschiedene Prozessoren nutzen. Im Hinblick auf eine *distributed memory* Architektur verteilen wir die dreidimensionalen Datenfelder auf zwei verschiedene Arten an die beteiligten Recheneinheiten:

• slices in y. Jede Einheit hält eine Anzahl von (x, z)-Datenebenen, so daß die zweidimensionalen Fouriertransformationen und Ableitungen in dieser Ebene lokal durchgefuehrt werden können. Die charakteristische Dimension der Datenfelder ist in diesen



ABBILDUNG 2. Aufteilung der Daten zur Parallelisierung des Algorithmus: Schnitte in y und zKoordinatenrichtung mit den resultierenden charakteristischen Dimensionen $N_x \times N_y/n_p \times N_z$ bzw. $N_x \times N_y \times N_z/n_p$ per Prozessor.

Bereichen des Algorithmus: $N_x \times N_y/n_p \times N_z$, wobei n_p die Anzahl der Prozessoren angibt und N_x , N_y , N_z die Anzahl der Moden/diskreten Gitterpunkte in den x, y, zRichtungen angibt (siehe auch Abbildung 2).

• slices in z. Jede Einheit hält (x, y)-Datenebenen. Tschebyscheff-Transformationen und Ableitungen in y sind möglich; ebenso die Galerkinlösung der eindimensionalen Helmholtzprobleme. Die charakteristische Dimension der Datenfelder ist in diesen Bereichen des Algorithmus: $N_x \times N_y \times N_z/n_p$.

Die Verteilung 'slice in z' wird nur zur Berechnung des nicht-linearen Konvektionsgliedes benötigt. Es muß also je einmal pro Zeitschritt zwischen den beiden Verteilungen hin und zurück gewechselt werden. Aus diesem Austausch besteht die Kommunikation unseres parallelen Algorithmus, welcher wiederum wie folgt schematisch dargestellt werden kann:

- Initialisierung, Einlesen der Parameter •
- jeder Prozessor erhält ein slice der Daten geschnitten in der z-Koordinate

zu jedem Zeitschritt n:

zu jedem Runge-Kutta Unterschritt k:

- swap der Daten zu einer Verteilung mit Schnitten in y

- Berechnung der nicht-linearen Terme außer der Ableitungen in yRückkehr zu einer Verteilung mit Schnitten in zAbschluß der Berechnung der nicht-linearen Terme: Ableitungen in y

Lösung der Helmholtzprobleme in der $y\text{-}\mathrm{Koordinatenrichtung}$

Ausgabe, Terminierung

4. Implementierung mittels MPI

Die Implementierung unseres parallelen Algorithmus basiert auf dem MPI Modell (Dialekt: FORTRAN). Wie im vorangegangenen Abschnitt erläutert wird der gesamte Datensatz zweimal pro Zeitschritt umsortiert, was als kommunikationsintensiv eingestuft wer-



ABBILDUNG 3. Anfallender Datentransfer beim Wechseln der Verteilung zwischen 'slice in z' (----) und 'slice in y' (-----) bzw. umgekehrt. Es werden bei jeder Umverteilung alle Pakete bis auf die Diagonalen (umrandete Bereiche) ausgetauscht. In der dritten Dimension beträgt die Datenlänge jeweils N_x .

den kann. Im einzelnen ist der jeweils anfallende globale Datenverkehr T durch die Formel

$$T \sim N_y \left(\frac{n_p - 1}{n_p}\right) N_z \left(\frac{n_p - 1}{n_p}\right) N_x \tag{4.1}$$

gegeben, was sich mit steigender Prozessoranzahl der globalen Dimension des Problems nähert (siehe Abbildung 3).

Der Datenverkehr ist derart, daß jedes mögliche Prozessorpaar (mit nicht-identischen Kennungen) ein Datenpaket austauscht. Somit ist die Funktion MPL_SENDRECV das geeignete Mittel. Zusätzlich handelt es sich im allgemeinen (d.h. identisch dann, wenn die Datenlängen in y und z ganzzahlige Vielfache der Prozessoranzahl n_p sind) bei den gegenseitig ausgetauschten Paketen um äquivalente Datenvolumina. Das folgende Schema zeigt den Ablauf eines Austausches von '*slice* in y' zu '*slice* in z' wie er von jeder Recheneinheit

(mit Kennung $0 < myid \le n_p$) durchgeführt wird:



Hierbei sind *jbeg*, *jend* und *kbeg*, *kend* die Zeiger, welche die Anfangs- und Endindizes der an die einzelnen Recheneinheiten zu verteilenden Datenabschnitte in y bzw. in zals Funktion der jeweiligen Kennung angeben. Zu beachten ist hier die Indizierung der Felder: der erste Index läuft in x-Richtung, welche immer die höchste Dimension hat; der zweite Index läuft entlang z, da die meiste Rechenzeit im Modus '*slice* in y' verbraucht wird, wo diese Dimension also die zweitgrößte ist.

5. Performance des Simulationsprogrammes: Eigene Vorarbeiten

Wir haben die Performance des Simulationsprogrammes anhand der folgenden Testrechnung gemesen. Die Dimension der Datenfelder beträgt $N_x = 192$, $N_y = 97$, $N_z = 128$, was einem gesamten globalen Datenvolumen von 280 MB entspricht (bei 64bit Darstellung der realen Zahlen). Wir lesen zunächst ein Datenfeld ein und führen 50 volle Zeitschritte durch bevor das Programm ohne weitere I/O Operationen terminiert. Zur Optimierung seitens des *compiler* siehe die Bemerkungen unter §5.2. Es sei außerdem darauf hingewiesen, daß die relative Bedeutung der I/O Operationen (und natürlich des ganzen *seriellen* Anteils des Programmmes) mit der Prozessoranzahl steigt. Dieser Anteil ist in den folgenden Zahlen enthalten.

5.1. Parallelität

Die Ergebnisse hinsichtlich der Parallelität unseres Programmes sind der Tabelle 1 zu entnehmen. Die relativen Größen speed-up S und Effizienz E sind auf die individuelle Ausführungszeit (t_n) bei einer Anzahl von 8 Prozessoren bezogen. Es zeigt sich, daß die Effizienz des Algorithmus bei $n_p = 48$ eine akzeptable Größe von 80% besitzt (dieser Parameter nimmt natürlich immer mit der Prozessoranzahl ab, da das Arbeitsvolumen der einzelnen Prozessoren abnimmt). Aufgrund des ausgetauschten Datenvolumens pro Zeitschritt eignet sich unsere Anwendung nicht besonders für extrem hohe Prozessoranzahlen $\mathcal{O}(1000)$. Aufgrund der limitierten praktischen Verfügbarkeit der Prozessoren und

n_p	8	24	48
$t_n [sec]$	586.25	197.35	122.77
S	1	2.97	4.78
E	1	0.99	0.80

TABELLE 1. Ergebnisse der Testrechnung zur Parallelität des Simulationsprogrammes als Funktion der Prozessoranzahl n_p im Falle einer Felddimension von $192 \times 97 \times 128$ und 50 Zeitschritten hinsichtlich Rechenzeit pro Prozessor t_n , speed-up S und Effizienz E. Es wurden ausschließlich Knoten mit einer Taktrate von 450 MHz der Cray T3E LC 384 des ZIB verwendet.

insbesondere nach Abschätzung der Wartezeit im *batch queue* System von berte.zib.de erscheint uns eine Anzahl von $n_p \leq 100$ angemessen für unsere Anwendung.

5.2. Einzelprozessorleistung

Unser Rechenprogramm ist auf verschiedenen Systemen getestet worden (u.a. SGI Origin, IBM SP2). Im Vergleich zur Ausführung auf einer IBM SP2 mit (älteren) RS6000 66MHz Knoten ist die individuelle Ausführungszeit des obigen Testfalles "nur" etwa 2.6fach kürzer auf berte.zib.de (bei einer Anzahl von 8 Prozessoren). Dies allein deutet darauf hin, daß die Einzelprozessorperformance von ihrem Optimum weit entfernt ist.

Erste Versuche zur Optimierung des Programmes für die Architektur der T3E Prozessoren bestanden naturgemäß in der Verwendung verschiedener *compiler*direktiven. Es stellte sich heraus, daß jenseits der Option -0 1 die numerischen Ergebnisse signifikant vom Referenzergebnis ohne Optimierung abweichen. Weitere Versuche, eine evtl. vorhandene lokalisierte numerische Fehlerquelle bei Optimierung zu identifizieren, führten bisher zu keinem Ergebnis. Es sollte noch erwähnt werden, daß das Verwenden der höchsten automatischen Optimierungsstufe -0 3, aggress lediglich zu einer Zeitersparnis von 6% führten (bei obigem Test mit 8 Prozessoren).

Ein ausführliches Profil der ausgeführten Operationen während der obigen Testrechnung (8 Prozessoren, 10 Zeitschritte) wurde mittels apprentice erstellt. Es zeigt sich, daß etwa 60% der gesamten Zeit durch *lokalen* Daten- und Instruktionstransfer (zwischen Prozessor, *caches* und Speicher) verlorengehen. In Kooperation mit dem zuständigen Fachberater des ZIB konnten einige erste Modifikationen durchgeführt werden, welche auf Kompatibilität mit dem Daten*cache* zielen. Hierdurch und durch ähnliche Eingriffe sind Einsparungen im zweistelligen Prozentbereich zu erwarten. Weitergehende Optimierungen hoffen wir mit Unterstützung der Fachberater des ZIB erreichen zu können. Eine zu verfolgende Strategie ist die gesteigerte Nutzung der *streams* insbesondere durch Reorganisation wichtiger Schleifen zur Kompatibilität mit der Anzahl der zu Verfügung stehenden *streams*. Das gesamte Potential für die Optimierung der Einzelprozessorleistung ist zum jetzigen Zeitpunkt schwer abzuschätzen.

6. Abschätzung der benötigten Ressourcen

Wie in §1 erwähnt verfolgen wir in der Theorie der Entstehung der turbulenten Energiekaskade einen asymptotischen Mehrskalenansatz, welcher Reibungseffekte einschließt. Da die numerischen Simulationen zwangsläufig bei niedrigen Reynoldszahlen durchgeführt werden, ist es sinnvoll diesen Parameter zu variieren. Wir planen Simulationen im Bereich $R_{\tau} \leq 600 \ (R_{\tau} = u_{\tau} h/\nu, u_{\tau} \text{ ist die Wandschubspannungsgeschwindigkeit}). Die Tabelle 2 gibt Aufschluß darüber , welche Auflösungen in diesem Bereich nötig sind, um in einer$

R_{τ}	N_x	N_y	N_z	Δx^+	Δy_c^+	Δz^+
180	128	97	96	8.8	5.9	5.9
395	256	193	192	10.0	6.5	6.5
590	384	257	384	9.7	7.2	4.8

TABELLE 2. Anforderungen an die numerische Resolution für turbulente, ebene Kanalströmung in einem Integrationsgebiet mit Länge $2\pi h$ und Breite πh in Abhängigkeit der Reynoldszahl R_{τ} . Die dimensionslos angegebenen Gitterweiten Δx^+ , Δy_c^+ , Δz^+ berücksichtigen nicht das *de-aliasing.*

Box der Länge $L_x = 2\pi h$ und der Breite $L_z = \pi h$ die turbulente Strömung – im statistischen Sinn – realistisch zu repräsentieren. Für unsere speziellen Zwecke der Analyse kleinskaliger Ereignisse wird darüber hinaus eine Verfeinerung bis zu einer Gitterdimension von ca. $512 \times 385 \times 512$ Gitterpunkten/Moden in einzelnen Fällen angestrebt. In dieser hochaufgelösten Rechnung werden bei Verwendung von 40 Prozessoreinheiten (PE's) jeweils etwa 300 MB Hauptspeicher belegt, was eine Ausführung in der Klasse 'himem' bedingt. Legt man eine physikalische Integrationszeit von $t_{sim} = 20h/U_0$ zugrunde so ergibt sich bei einer individuellen Rechenzeit (40 PE's) von 80 s/Zeitschritt (zum heutigen Stand der Optimierung) und einem Zeitschritt von $\Delta t = 0.0025 h/U_0$ eine individuelle Ausführungszeit von 178 h, d.h. in etwa 440 ZPL. Darüberhinaus muß eine realistische Anfangsbedingung für jeden Parameterpunkt generiert werden, d.h. wir müssen die Transition von der laminaren Lösung bis zum vollturbulenten Zustand simulieren. Die hierzu notwendige physikalische Zeitspanne kann mit $t_{trans} = 100 h/U_0$ abgeschätzt werden. Folglich benötigen wir für ein komplettes numerisches Experiment rund 2500 ZPL. Aufgrund der angestrebten Variation der Parameter (Reynoldszahl, Größe des Integrationsgebietes) gelangen wir zu folgender Summe benötigter Leistungseinheiten im Rahmen unseres Projektes:

20000 ZPL.

Dieses Volumen benötigen wir im Laufe des ersten Jahres, da unsere folgenden Arbeiten (Filteroperationen, asymptotische Analyse) auf den erzeugten Datensätzen aufbauen. Die zu erwartende zeitliche Verteilung ist gleichförmig, also:

-
5000 ZPL
5000 ZPL
5000ZPL
5000ZPL

Der anfallende permanente Massenspeicherplatz bei einer hochaufgelösten Simulation wird die Benutzerquote für das Filesystem **perme** überschreiten, so daß Daten auf Magnetband ausgelagert werden müssen. Während eines Simulationslaufes über 8 h ist zu erwarten, daß ca. 10 Datenfelder generiert werden, welche einer Dateigröße von jeweils 706 MB entsprechen. Um zu vermeiden, dass durch Wartezeiten der *data migration facility* ein Konflikt mit der Benutzerquote im Bereich **perme** entsteht, wird es evtl. nötig sein, diese Quote zu erhöhen.

REFERENZEN

FRIEDRICH, O., SCHRÖDER-PANDER, F. & SONAR, T. 1998 Generalized multi-resolution analysis on unstructured grids. Hamburger Beiträge zur angewandten Mathematik, F5.

GRAHS, T. 1998 Fourier-Analyse aus Mittelwerten auf unstrukturierten Gittern. Hamburger Beiträge zur angewandten Mathematik, F6.

- KIM, J., MOIN, P. & MOSER, R. 1987 Turbulence statistics in a fully developed channel flow at low Reynolds number. J. Fluid Mech. 177, 133–166.
- KLEIN, R. 1994 Zur Dynamik schlanker Wirbel. Habilitationsschrift, Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen.
- KLEIN, R. 1995 Semi-implicit extension of a Godunov-type compressible flow solver based on low Mach number asymptotics I: One-dimensional flow. J. Comp. Phys. 121, 213–237.
- KLEIN, R. & KNIO, O. 1995 Asymptotic vorticity structure and numerical simulation of slender vortex filaments. J. Fluid Mech. 284, 275–321.
- KLEIN, R. & MAJDA, A. 1991a Self-stretching of a perturbed vortex filament I: The asymptotic equation for deviations from a straight line. *Physica D* **49**, 323–352.
- KLEIN, R. & MAJDA, A. 1991b Self-stretching of a perturbed vortex filament II: The structure of solutions. *Physica D* 53, 267–294.
- KNIO, O., KLEIN, R. & TING, L. 1995 Representation of core dynamics in slender vortex filament simulations. Phys. Fluids A 8, 2415.
- MEISTER, A. & SONAR, T. 1997 Asymptotische Entwicklungen und ihre Anwendungen in technischen Problemstellungen. Vorlesungsmanuskript, TU Hamburg-Harburg.
- TING, L. & KLEIN, R. 1991 Viscous Vortical Flows, Lecture Notes in Physics, vol. 374. Springer.

n_p	8	24	48	96
$t_n [sec]$	520	210	110	71
S	1	2.48	4.73	7.31
E	1	0.83	0.79	0.60

TABELLE 3. Ergebnisse der Testrechnung zur Parallelität des Simulationsprogrammes als Funktion der Prozessoranzahl n_p im Falle einer Felddimension von $192 \times 97 \times 128$ und 50 Zeitschritten hinsichtlich Rechenzeit pro Prozessor t_n , speed-up S und Effizienz E. Es wurden ausschließlich Knoten mit einer Taktrate von 450 MHz der Cray T3E LC 384 des ZIB verwendet. Die Optimierung beinhaltet das Ersetzen von MPI_SENDRECV durch MPI_BCAST in der Routine SAVECO sowie einige explizite Compileranweisungen zur Nutzung der e-registers.

Appendix A. Performance nach Ausführung von Optimierungsschritten