

Eine Sammlung von DROPS aller Geschmacksrichtungen

Inhaltsverzeichnis

1	geom: Geometrie	2
1.1	Tetraeder und Subsimplices	2
1.2	Das MultiGrid	2
1.3	MultiGrid-Builder	3
1.3.1	BrickBuilderCL	4
1.3.2	LBuilderCL	4
1.3.3	BBuilderCL	5
1.3.4	ReadMeshBuilderCL	5
2	poisson: Poisson-Gleichung	5
2.1	stationäre Poisson-Gleichung	5
2.2	instationäre Poisson-Gleichung	6
3	stokes: Stokes-Gleichung	6
3.1	stationäre Stokes-Gleichung	6
3.2	instationäre Stokes-Gleichung	6
4	navstokes: Navier-Stokes-Gleichung	6
4.1	stationäre Navier-Stokes-Gleichung	6
4.2	instationäre Navier-Stokes-Gleichung	6
5	levelset: Levelset-Methode	7
6	num: Numerik	7
6.1	Vektoren und dünnbesetzte Matrizen	7
6.2	Vorkonditionierer	8
6.2.1	Vorkonditionierer für die stationären Stokes-Gleichungen	9
6.3	Poisson-Löser	9
6.4	Stokes-Löser	10
6.4.1	Schur-Verfahren	11
6.4.2	Uzawa-Verfahren	11
6.5	Navier-Stokes-Löser	12
7	Zeitintegration	13
7.1	θ -Schema	13
7.2	Fractional-Step-Verfahren	13
8	out: Ausgabe	13

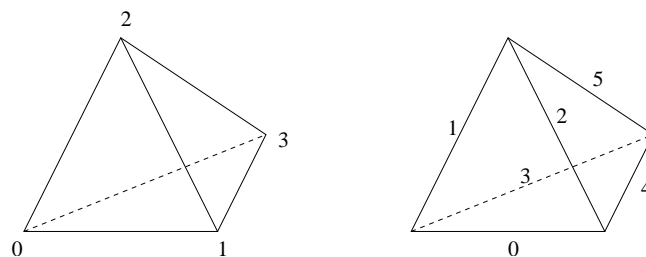
8.1	Ausgabe in Geomview	13
8.2	Ausgabe in TecPlot	14
8.3	Ausgabe in Ensight	14
8.4	Einlesen von bereits berechneten Daten im Ensight-Format	15
8.4.1	Implementierungsdetails	16
9	misc: Verschiedenes	17
9.1	Einlesen von Parameterdaten	17
A	Durchführen einer Simulation mit DROPS	19
A.1	Erste Schritte: Übersetzung des Quelltextes	19
A.1.1	Hinweise für die DROPS-Entwickler:	19
A.2	Starten einer Rechnung	20
B	Mit GAMBIT Gitter für DROPS erzeugen	20
C	Parameter Files	20
C.1	Stokes Flow, zweiphasig	20
C.2	Navier-Stokes Flow, zweiphasig	24

1 geom: Geometrie

1.1 Tetraeder und Subsimplices

Datenstrukturen für die Subsimplices (Knoten, Kanten, Seitenflächen) und die Simplicies (Tetraeder): `VertexCL`, `EdgeCL`, `FaceCL`, `TetraCL` (siehe `multigrid.h/cpp`).

Jeder Tetraeder hat Zugriff auf seine 4 Knoten, 6 Kanten und 4 Seitenflächen. Die interne Nummerierung dieser Subsimplices auf einem Tetraeder kann der folgenden Skizze entnommen werden:



Die Seitenfläche i liegt dem Knoten i gegenüber. All diese topologischen Informationen sind in `topo.h/cpp` festgehalten.

1.2 Das MultiGrid

Das MultiGrid \mathcal{M} ist durch die `MultiGridCL` repräsentiert. Darin sind die Tetraeder und Subsimplices nach Leveln geordnet abgespeichert. Das Level eines Objektes gibt gerade die Anzahl seiner Vorfahren an, entsprechend besitzt das größte Level die Nummer 0. Alle Tetraeder eines Levels k formen das

sogenannte *Gitter der Stufe k*:

$$\mathcal{G}_k = \{T \in \mathcal{M} : \ell(T) = k\} .$$

Die *Triangulierung der Stufe k* wird vom Gitter \mathcal{G}_k und allen gröberen Tetraedern $T \in \mathcal{G}_j, j < k$, die nicht verfeinert sind, gebildet:

$$\mathcal{T}_k := \mathcal{G}_k \cup \bigcup_{j < k} \{T \in \mathcal{G}_j : T \text{ ist unverfeinert}\} .$$

```
class MultiGridCL
{
    MultiGridCL (const MGBuilderCL& Builder);

    void Refine ();
    void Scale( double);
    void MakeConsistentNumbering();
    void SizeInfo(std::ostream&);
    void ElemInfo(std::ostream&, int Level= -1);

    bool IsSane (std::ostream&, int Level=-1) const;

    VertexIterator      GetVerticesBegin    (int Level);
    VertexIterator      GetVerticesEnd      (int Level);
    AllVertexIteratorCL GetAllVertexBegin   (int Level=-1);
    AllVertexIteratorCL GetAllVertexEnd     (int Level=-1);
    TriangVertexIteratorCL GetTriangVertexBegin (int Level=-1);
    TriangVertexIteratorCL GetTriangVertexEnd (int Level=-1);
    // ... und dasselbe mit const_Iteratoren
    // ... und fuer Edge, Face, Tetra
};
```

Der Zugriff auf die Tetraeder und Subsimplices erfolgt über entsprechende Iteratoren, die sich drei Kategorien zuordnen. Am Beispiel der Tetraeder sind dies:

- **TetraIterator** iteriert über alle Tetraeder $T \in \mathcal{G}_k$ eines Gitters \mathcal{G}_k .
- **AllTetraIteratorCL** iteriert über alle Tetraeder $T \in \bigcup_{j \leq k} \mathcal{G}_j$ bis zum Gitter \mathcal{G}_k .
- **TriangTetraIteratorCL** iteriert über alle Tetraeder $T \in \mathcal{T}_k$ der Triangulierung \mathcal{T}_k .

Der Verfeinerungsalgorithmus wird durch die Elementfunktion **Refine** aufgerufen und verfeinert alle Tetraeder des MultiGrids \mathcal{M} , die zur Verfeinerung markiert sind (Ein Tetraeder wird durch Aufruf seiner Elementfunktion **TetraCL::SetRegRefMark** zur Verfeinerung markiert).

Ein MultiGrid wird mit Hilfe eines **MGBuilderCL**-Objektes erzeugt (siehe Konstruktor von **MultiGridCL**), welche im nächsten Abschnitt behandelt werden.

1.3 MultiGrid-Builder

Die Anfangstriangulierung $\mathcal{T}_0 = \mathcal{G}_0$ wird mit Hilfe einer Builder-Klasse konstruiert (siehe **geom/builder.h/cpp**). Derzeit gibt es in DROPS folgende Builder:

- **BrickBuilder** zur Erzeugung eines Quaders.
- **LBuilder** zur Erzeugung eines L-Gebietes.
- **BBuilder** zur Erzeugung eines B-Gebietes (Quader mit einspringender Ecke).
- **ReadMeshBuilderCL** liest GAMBIT (FLUENT) Mesh-Files.

```

class BrickBuilderCL : public MGBuilderCL
{
    BrickBuilderCL(const Point3DCL& orig, const Point3DCL& e1, const Point3DCL& e2, const Point3DCL& e3,
                    Uint n1, Uint n2, Uint n3);
};

class LBuilderCL : public MGBuilderCL
{
    LBuilderCL(const Point3DCL& origin, const Point3DCL& e1, const Point3DCL& e2, const Point3DCL& e3,
                Uint n1, Uint n2, Uint n3, Uint b1, Uint b2);
};

class BBuilderCL : public MGBuilderCL
{
    BBuilderCL(const Point3DCL& origin, const Point3DCL& e1, const Point3DCL& e2, const Point3DCL& e3,
                Uint n1, Uint n2, Uint n3, Uint b1, Uint b2, Uint b3);
};

class ReadMeshBuilderCL : public MGBuilderCL
{
    // Input stream, from which the mesh is read. Pass a pointer to an output stream,
    // e. g. msg= &std::cerr, if you want to know, what happens during multigrid-construction.
    ReadMeshBuilderCL(std::istream& f, std::ostream* msg= 0);

    BndCondT GetBC( Uint i) const;
    void      GetBC( std::vector<BndCondT>& BC) const;
};

```

1.3.1 BrickBuilderCL

Der Quader wird festgelegt durch den Ursprung **orig** und die aufspannenden Vektoren **e1**, **e2**, **e3**. Der Quader wird dann in $n1 \times n2 \times n3$ Unterquader zerlegt, von denen jeder in 6 Tetraeder unterteilt wird.

Die 6 Randsegmente des Quaders werden in folgender Reihenfolge abgespeichert (als Beispiel der Einheitswürfel $\Omega = [0, 1]^3$):

- $x = 0, \quad x = 1,$
- $y = 0, \quad y = 1,$
- $z = 0, \quad z = 1.$

1.3.2 LBuilderCL

Das L-Gebiet wird ähnlich wie der Quader festgelegt. Die zusätzlichen Parameter $b1 < n1$, $b2 < n2$ legen die Aussparung des L-Gebietes fest, welche dem Ursprung gegenüber liegt und aus $(n1 - b1) \times (n2 - b2) \times n3$ Unterquadern besteht.

Die 14 Randsegmente des L-Gebietes werden in folgender Reihenfolge abgespeichert (als Beispiel das L-Gebiet $\Omega = [0, 1]^3 \setminus ([0.5, 1]^2 \times [0, 1])$):

- $x = 0, y \in [0, 0.5], \quad x = 0, y \in [0.5, 1], \quad x = 1, y \in [0, 0.5], \quad x = 0.5, y \in [0.5, 1],$
- $y = 0, x \in [0, 0.5], \quad y = 0, x \in [0.5, 1], \quad y = 1, x \in [0, 0.5], \quad y = 0.5, x \in [0.5, 1],$
- $z = 0, (x, y) \in [0, 0.5] \times [0, 0.5], \quad z = 0, (x, y) \in [0, 0.5] \times [0.5, 1], \quad z = 0, (x, y) \in [0.5, 1] \times [0, 0.5],$
 $z = 1, (x, y) \in [0, 0.5] \times [0, 0.5], \quad z = 1, (x, y) \in [0, 0.5] \times [0.5, 1], \quad z = 1, (x, y) \in [0.5, 1] \times [0, 0.5].$

1.3.3 BBuilderCL

Das B-Gebiet wird ähnlich wie der Quader festgelegt. Die zusätzlichen Parameter $b1 < n1$, $b2 < n2$, $b3 < n3$ legen die Aussparung des B-Gebietes fest, welche dem Ursprung gegenüber liegt und aus $(n1 - b1) \times (n2 - b2) \times (n3 - b3)$ Unterquadern besteht.

Die 24 Randsegmente des L-Gebietes werden in folgender Reihenfolge abgespeichert (als Beispiel das L-Gebiet $\Omega = [0, 1]^3 \setminus [0.5, 1]^3$):

- $x = 0, (y, z) \in [0, 0.5] \times [0, 0.5], \quad x = 0, (y, z) \in [0, 0.5] \times [0.5, 1], \quad x = 0, (y, z) \in [0.5, 1] \times [0, 0.5],$
 $x = 0, (y, z) \in [0.5, 1] \times [0.5, 1],$
 $x = 1, (y, z) \in [0, 0.5] \times [0, 0.5], \quad x = 1, (y, z) \in [0, 0.5] \times [0.5, 1], \quad x = 1, (y, z) \in [0.5, 1] \times [0, 0.5],$
 $x = 0.5, (y, z) \in [0.5, 1] \times [0.5, 1].$
- analog für die x - z -Ebene.
- analog für die x - y -Ebene.

1.3.4 ReadMeshBuilderCL

Der Builder versteht das Format des „User’s Guide“ zu TGrid 3, Anhang C, welches unter anderem von RAMPANT, FLUENT/UNS, TGrid verwendet wird und von dem Gittergenerator GAMBIT erzeugt wird. Die ID’s der erzeugten Simplesices entsprechen denen in der Datei.

Um Randsegmente zu repräsentieren, wird die Klasse `MeshBoundaryCL` verwendet. Pro Zone von Rand-dreiecken in der .msh-Datei wird ein `MeshBoundaryCL`-Objekt erzeugt, welches die zone-id und die boundary-condition enthält (siehe Anhang C des User’s Guide).

Zur Erstellung von Gittern mit GAMBIT sei auf die Hinweise in Abschnitt B verwiesen.

2 poisson: Poisson-Gleichung

2.1 stationäre Poisson-Gleichung

Auf dem Gebiet Ω sei die (verallgemeinerte) Poissongleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u(x) + q(x) \cdot u(x) &= f(x) && \text{in } \Omega \\ u(x) &= g_D(x) && \text{auf } \Gamma_D \\ \frac{\partial u(x)}{\partial n} &= g_N(x) && \text{auf } \Gamma_N \end{aligned}$$

gegeben, wobei die disjunkten Randstücke $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \partial\Omega$ den Dirichlet- bzw. Neumannrand darstellen.

Für die Finite-Elemente-Diskretisierung mit P_1 -Elementen steht die Problemklasse `PoissonP1CL` zur Verfügung:

```
template <class MGB, class Coeff>
class PoissonP1CL: public ProblemCL<MGB, Coeff, PoissonBndDataCL>
{
    IdxDescCL idx;
    VecDescCL x;
    VecDescCL b;
    MatDescCL A;

    PoissonP1CL(const MultiGridBuilderCL& mgb, const CoeffCL& coeff, const BndDataCL& bdata);
    // numbering of unknowns
    void CreateNumbering( UInt, IdxDescCL* );
    void DeleteNumbering( IdxDescCL* );
    // set up matrices and rhs
    void SetupSystem      ( MatDescCL&, VecDescCL& ) const;
```

```

void SetupStiffnessMatrix(MatDescCL&) const;
void SetupProlongation (MatDescCL& P, IdxDescCL* cIdx, IdxDescCL* fIdx) const;
// check computed solution etc.
double CheckSolution(const VecDescCL&, scalar_fun_ptr) const;
double CheckSolution(scalar_fun_ptr Lsg) const { return CheckSolution(x, Lsg); }
void GetDiscError (const MatDescCL&, scalar_fun_ptr) const;
void GetDiscError (scalar_fun_ptr Lsg) const { GetDiscError(A, Lsg); }

bool EstimateError (const VecDescCL&, const double, double&, est_fun);
static double ResidualErrEstimator (const TetraCL&, const VecDescCL&, const BndDataCL&);
static double ResidualErrEstimatorL2(const TetraCL&, const VecDescCL&, const BndDataCL&);

DiscSolCL GetSolution() const;
};

```

2.2 instationäre Poisson-Gleichung

Auf dem Gebiet Ω sei die instationäre Poissongleichung bzw. Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \alpha(x,t)\Delta u(x,t) &= f(x,t) && \text{in } \Omega \times [0, t_f] \\
u(x, 0) &= u_0(x) && \text{in } \Omega \\
u(x, t) &= g_D(x) && \text{auf } \Gamma_D \times [0, t_f] \\
\alpha(x, t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial n} &= g_N(x) && \text{auf } \Gamma_N \times [0, t_f]
\end{aligned}$$

gegeben. Beachte folgende Unterschiede zum stationären Problem:

- Die Temperaturleitfähigkeit $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c} = \alpha(x, t)$ kann örtlich und zeitlich variieren und wird in der Diskretisierung der Steifigkeitsmatrix berücksichtigt. Beachte, dass sich dadurch die homogene natürliche Randbedingung ändert ($\alpha \frac{\partial u}{\partial n}$ statt $\frac{\partial u}{\partial n}$)!
- Der Term $q(x) \cdot u(x, t)$ taucht in der instationären Poissongleichung nicht mehr auf (im Gegensatz zur stationären Gleichung). Die Diskretisierung dieses Terms wurde auskommentiert, da er bislang nicht gebraucht wurde, er kann bei Bedarf aber wieder berücksichtigt werden.

3 stokes: Stokes-Gleichung

3.1 stationäre Stokes-Gleichung

3.2 instationäre Stokes-Gleichung

4 navstokes: Navier-Stokes-Gleichung

4.1 stationäre Navier-Stokes-Gleichung

4.2 instationäre Navier-Stokes-Gleichung

5 levelset: Levelset-Methode

Die `LevelsetP2CL` implementiert die Funktionalität der Levelset-Methode für P_2 -Elemente.

```
template<class StokesProblemT>
class LevelsetP2CL
{
    LevelsetP2CL( MultiGridCL& mg, double theta= 0.5, double SD= 0.);

    void CreateNumbering( Uint level, IdxDescCL*);
    void DeleteNumbering();
    void Init( scalar_fun_ptr);
    // call SetupSystem *before* calling SetTimeStep!
    void SetupSystem( const DiscVelSolCL& vel);
    void SetTimeStep( double dt);
    void DoStep();
    void Reparam( Uint steps, double dt);

    bool Intersects( const TetraCL&) const;
    double GetMass() const;
    static void AccumulateBndIntegral( const MultiGridCL&, VecDescCL& f, const VecDescCL& Phi, double sigma);

    DiscSolCL GetSolution() const;
};
```

6 num: Numerik

6.1 Vektoren und dünnbesetzte Matrizen

Datentypen für Vektoren und dünnbesetzte Matrizen sind in der Datei `num/spmat.h` definiert.

Als Vektordatentyp dient die Template-Klasse `VectorBaseCL<T>`, die direkt von `std::valarray<T>` abgeleitet ist und so die *expression templates* der Valarrays ausnutzt. Wenn `DebugNumericC` als Debug-Option gesetzt ist, findet beim Zugriff auf Vektoreinträge mit `[]` sowie bei Benutzung der Operatoren `+`, `-`, `=`, `+=`, `-=`, `*`, `/=` eine Bereichsprüfung statt (im Gegensatz zum reinen `valarray`). Folgende Funktionen sind für Vektoren definiert:

- `dot(x,y)` berechnet das Skalarprodukt $x^T y$,
- `norm(x)` berechnet die euklidische Norm $\|x\|_2$, `norm_sq(x)` dessen Quadrat $\|x\|_2^2$,
- `supnorm(x)` berechnet die Maximumsnorm $\|x\|_\infty$,
- `axpy(a,x,y)` für $y += a*x$,
- `z_xpay(z,x,a,y)` für $z = x + a*y$,
- `z_xpaypy2(z,x,a,y,b,y2)` für $z = x + a*y + b*y2$.

Die dünnbesetzten Matrizen werden in einem zeilenbasierten Format gespeichert und durch folgende Template-Klasse realisiert:

```
template <typename T>
class SparseMatBaseCL
{
    SparseMatBaseCL (size_t rows, size_t cols, size_t nz);

    size_t num_rows      () const;
    size_t num_cols      () const;
    size_t num_nonzeros   () const;

    inline T operator() (size_t i, size_t j) const;
    SparseMatBaseCL& operator*= (T c);
};
```

```

SparseMatBaseCL& operator/= (T c);
SparseMatBaseCL& LinComb (double, const SparseMatBaseCL<T>&,
                          double, const SparseMatBaseCL<T>&);
void clear();
};

```

Mit Hilfe der Funktion `LinComb` wird die Matrix als Linearkombination zweier anderer Matrizen erzeugt (interessant bei der Zeitintegration: $\frac{1}{dt}M + \theta A$). Die Funktion `clear` dagegen löscht den Inhalt der Matrix.

Matrix-Vektor-Multiplikation erfolgt mit `A*x` für Ax und `transp_mul(A,x)` für $A^T x$.

Da das *sparsity pattern* einer Matrix vorher meist nicht bekannt ist, wird beim Aufstellen der Matrizen zunächst ein Zwischenformat, die `SparseMatBuilderCL` erzeugt, in der das *sparsity pattern* aufgebaut wird, bevor schließlich die endgültige Matrix mit dem Befehl `Build` erzeugt wird.

```

template <typename T>
class SparseMatBuilderCL
{
    SparseMatBuilderCL(spmatT* mat, size_t rows, size_t cols);

    T& operator() (size_t i, size_t j);
    void Build();
};

```

Besitzt die an den Builder übergebene Matrix bereits ein *sparsity pattern*, so wird dieses aus Effizienzgründen wiederverwendet. Deswegen sollte nach jeder Gitteränderung der Inhalt der Matrizen mit `clear` gelöscht werden, um das *sparsity pattern* neu aufbauen zu lassen.

Zur einfacheren Handhabung sind die folgenden typedefs definiert:

```

typedef VectorBaseCL<double>      VectorCL;
typedef SparseMatBaseCL<double>    MatrixCL;
typedef SparseMatBuilderCL<double> MatrixBuilderCL;

```

6.2 Vorkonditionierer

Die Vorkonditionierer für ein lineares Gleichungssystem $Ax = b$ sind in `num/solver.h` definiert. Sie haben im wesentlichen die folgende Struktur:

```

template <PreMethGS PM>
class PreGSCL<PM, false>
{
    private:
        double _omega;

    public:
        PreGSCL (double om= 1.0) : _omega(om) {}

        template <typename Vec>
        void Apply(const MatrixCL& A, Vec& x, const Vec& b) const
};

```

Die Funktion `Apply` wendet den Vorkonditionierer an. Zur Zeit gibt es folgende Verfahren:

- `SORsmoothCL`, Gauss-Seidel-Verfahren mit Überrelaxation.
- `SGSPcCL`, symmetrisches Gauss-Seidel-Verfahren für den Startvektor $x = 0$.
- `SSORPcCL`, SSOR-Verfahren für den Startvektor $x = 0$.
- `SSORDiagPcCL`, SSOR-Verfahren, für schnelleren Zugriff auf die Diagonale von A optimiert.
- `DummyPcCL`, die Identität als trivialer Vorkonditionierer.

Ferner existiert die Funktion `SolveGSstep(const PreDummyCL<PB_JAC>&, const MatrixCL& A, Vec& x, const Vec& b, double omega)`, die einen Jacobi-Schritt zum Startvektor x durchführt. Der Funktionsname ist durch die Auswahlregeln für überladene Funktionen in C++ bedingt.

Die eigentliche Information über den Typ des Vorkonditionierers steckt in `enum PreMethGS` bzw. der Template-Klasse `template <PreBaseGS> class PreDummyCL {}`, die die `enum`-Werte auf eigene C++-Typen abbildet.

6.2.1 Vorkonditionierer für die stationären Stokes-Gleichungen

In `stokes/sdropsP2.cpp` befindet sich die Klasse

```
class MGPreCL
{
    MGPreCL( const MGDDataCL& mgd, const MatrixCL& ps);

    template <typename Mat, typename Vec>
    void
    Apply(const Mat& K, Vec& x, const Vec& b) const;
};
```

Sie implementiert einen Blockdiagonal-Vorkonditionierer für die stationären Stokes-Gleichungen. Die Argumente x , b von `Apply` müssen Zugriff auf die Geschwindigkeitskomponenten ermöglichen (via der Elementfunktion u) und ebenso auf die Druckkomponenten (via p). Dies leistet im Moment die Vektorklasse `StokesVectorCL`, welche in `stokes/sdropsP2.cpp` definiert ist.

Die Matrix K repräsentiert die Block-Matrix zu den Stokes-Gleichungen und muß Zugriff auf die Teilmatrizen A und B erlauben. Zur Zeit die in `stokes/sdropsP2.cpp` definierte Klasse `StokesMatrixCL` eingesetzt.

Der Vorkonditionierer verwendet für den Poissonanteil der Stokes-Gleichungen eine Iteration des übergebenen Mehrgitter-V-Zyklus mit den in diesem eingestellten Glättern.

Die Schur-Komplementmatrix wird durch einen SSOR-Schritt mit der P_2 -Massenmatrix vorkonditioniert.

Als traditionelle Alternative kann ein ähnlicher aufgebauter Vorkonditionierer vom Typ

```
class FullPreCL
{
    FullPreCL( const MatrixCL& ps);

    template <typename Mat, typename Vec>
    void
    Apply(const Mat& K, Vec& x, const Vec& b) const;
};
```

verwendet werden. Im Unterschied zu `MGPreCL` wird hier der Poissonanteil mit Hilfe eines SSOR-vorkonditionierten PCG-Lösers näherungsweise gelöst.¹

Beide Vorkonditionierer liefern bereits korrekte Ergebnisse. Die Implementierung hat sich jedoch in Details noch nicht stabilisiert. Deshalb befindet sich der gesamte Code in `stokes/sdropsP2.cpp`.

6.3 Poisson-Löser

Die iterativen Löser für lineare Gleichungssysteme sind in `num/solver.h` implementiert. Es gibt einen CG-Löser,

¹Diese Klasse ist viel ineffizienter als `MGPreCL`.

```
template <typename Mat, typename Vec>
bool
CG(const Mat& A, Vec& x, const Vec& b, int& max_iter, double& tol),
```

einen PCG-Löser, der die in 6.2 beschriebenen Vorkonditionierer verwenden kann:

```
template <typename Mat, typename Vec, typename PreCon>
bool
PCG(const Mat& A, Vec& x, const Vec& b, const PreCon& M,
    int& max_iter, double& tol),
```

Ein MINRES-Löser

```
template <typename Mat, typename Vec>
bool
MINRES(const Mat& A, Vec& x, const Vec& rhs, int& max_iter, double& tol);
```

und ein vorkonditionierter PMINRES-Löser

```
template <typename Mat, typename Vec, typename Lanczos>
bool
PMINRES(const Mat& A, Vec& x, const Vec& rhs, Lanczos& q, int& max_iter, double& tol);
```

stehen zur Verfügung. Sie können auch direkt zum Lösen der Stokes-Gleichungen verwendet werden. Beispiele dazu findet man in `stokes/sdropsP2`.

Ferner existiert eine GMRES-Implementierung:

```
template <typename Mat, typename Vec, typename PreCon>
bool
GMRES(const Mat& A, Vec& x, const Vec& b, const PreCon& M,
    int m, int& max_iter, double& tol).
```

Um die Handhabung der Löser zu erleichtern gibt es die Klasse

```
class SolverBaseCL
{
protected:
    int    _maxiter, _iter;
    double _tol, _res;

    SolverBaseCL (int maxiter, double tol)
        : _maxiter(maxiter), _iter(-1), _tol(tol), _res(-1.) {}

public:
    void SetTol    (double tol) { _tol= tol; }
    void SetMaxIter(int iter)   { _maxiter= iter; }

    double GetTol    () const { return _tol; }
    int    GetMaxIter() const { return _maxiter; }
    double GetResid   () const { return _res; }
    int    GetIter    () const { return _iter; }
},
```

welche als Basisklasse für die iterativen Löser dient. Die abgeleiteten Klassen enthalten die Elementfunktion `Solve`. Diese ruft den eigentlichen Löser mit den vorher gewählten Parametern auf.

6.4 Stokes-Löser

Die Stokes-Löser ermitteln die Lösung eines linearen Gleichungssystems der Form

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix}.$$

Sie sind in `num/stokessolver.h` implementiert.

6.4.1 Schur-Verfahren

Die Schur-Komplementmatrix $S = BA^{-1}B^T$ wird in Drops durch die Klasse `SchurComplMatrixCL` in `stokes/stokes.h` realisiert. Der Matrix-Vektor-Multiplikationsoperator verwendet zu Lösung des Gleichungssystems mit A ein PCG-Verfahren mit dem in der `SchurComplMatrixCL` definierten Vorkonditionierer. Dies ist gegenwärtig die `SSORPcCL`.

Damit kann das Schur-Verfahren in `SchurSolverCL` und `PSchurSolverCL` so darstellen:

1. $r = BA^{-1}b - c$ berechnen: $r = -c$, $Av = b$ lösen, $r += Bv$.
2. $Sp = r$ lösen.
3. $Av = b - B^T p$ lösen.

Beide Klassen verwenden in Schritt 1 und 3 einen der Poissonlöser, dessen Typ als Template-Parameter in die Klasse gebracht wird (Hält eine Referenz auf den Löser.). Ein Objekt vom Lösertyp wird erst durch öffentliches Ableiten zugefügt. In Schritt 2 verwendet `SchurSolverCL` das CG-Verfahren und `PSchurSolverCL` ein PCG-Verfahren mit SSOR-Vorkonditionierung einer Matrix in den Druckunbekannten (z. B. Massenmatrix).

Zur einfacheren Handhabung werden folgende abgeleiteten Klassen bereitgestellt:

```
class Schur_PCG_CL: public SchurSolverCL<PCG_SsorCL>
{
    Schur_PCG_CL(int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol);
};

class PSchur_PCG_CL: public PSchurSolverCL<PCG_SsorCL>
{
    PSchur_PCG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol);
};

class PSchur_IPCG_CL: public PSchurSolverCL<PCG_SsorDiagCL>
{
    PSchur_IPCG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol);
};

class PSchur_GSPCG_CL: public PSchurSolverCL<PCG_SgsCL>
{
    PSchur_GSPCG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol);
};

class PSchur_MG_CL: public PSchurSolverCL<MGSolverCL>
{
    PSchur_MG_CL( MatrixCL& M,          int outer_iter, double outer_tol,
                  MGDataCL& MGData, int inner_iter, double inner_tol );
};
```

6.4.2 Uzawa-Verfahren

Die folgenden Uzawa-Verfahren stehen zur Verfügung:

```
template <typename PoissonSolverT>
class UzawaSolverCL : public SolverBaseCL
{
    UzawaSolverCL (PoissonSolverT& solver, MatrixCL& M, int maxiter, double tol, double tau= 1.);

    void Solve( const MatrixCL& A, const MatrixCL& B, VectorCL& v, VectorCL& p,
                const VectorCL& b, const VectorCL& c);
// ...
};
```

```

class Uzawa_IPCG_CL : public SolverBaseCL
{
    Uzawa_IPCG_CL(MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol, double tau= 1.);

    // Always call this when A has changed, before Solve()!
    void Init_A_Pc(MatrixCL& A) { _A_IPCGsolver.GetPc().Init(A); }

    inline void Solve( const MatrixCL& A, const MatrixCL& B, VectorCL& v, VectorCL& p,
                      const VectorCL& b, const VectorCL& c);

    // ...
};

```

In der ersten Klasse ist der Typ des Poissonl6sers als Template-Parameter gegeben. F6r die in DROPS vorhandenen Poisson-Verfahren existieren in `num/stokessolver.h` von `UzawaSolverCL` abgeleitete Klassen, die den entsprechenden L6ser in den im folgenden Algorithmus auftretenden Poisson-Problemen einsetzen:

1. $Mdp = (Bv - c)$ l6sen.
2. $p+ = dp$.
3. $Adv = Av + B^T p - b$ l6sen.
4. $v- = dv$.

In der Klasse `Uzawa_IPCG_CL` k6nnen in Schritt 1 und 3 unterschiedliche Poisson-Verfahren benutzt werden. Zur Zeit sind beide L6ser SSOR-vorkonditionierte PCG-Verfahren.

Zur einfacheren Handhabung werden folgende abgeleiteten Klassen bereitgestellt:

```

class Uzawa_CG_CL : public UzawaSolverCL<CGSolverCL>
{
    Uzawa_CG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol, double tau= 1.);
};

class Uzawa_PCG_CL : public UzawaSolverCL<PCG_SsorCL>
{
    Uzawa_PCG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol, double tau= 1.);
};

class Uzawa_SGSPCG_CL : public UzawaSolverCL<PCG_SgsCL>
{
    Uzawa_SGSPCG_CL( MatrixCL& M, int outer_iter, double outer_tol, int inner_iter, double inner_tol, double tau= 1.);
};

class Uzawa_MG_CL : public UzawaSolver2CL<PCG_SsorCL, MGSolverCL>
{
    Uzawa_MG_CL(MatrixCL& M,          int outer_iter, double outer_tol,
                MGDataCL& MGData, int inner_iter, double inner_tol, double tau= 1.);
};

```

6.5 Navier-Stokes-L6ser

In `num/nssolver.h` sind die L6sungsverfahren f6r die station6ren Navier-Stokes-Gleichungen definiert. Sie l6sen das nicht-lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} A + \alpha N(v) & B^T p \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix}.$$

Der Parameter α ist hier stets 1, wird jedoch f6r die Zeitintegration ben6tigt. In DROPS wird ein Fixpunktverfahren eingesetzt, in dem folgende Schritte bis zur Konvergenz iteriert werden:

1. Stelle $N(v)$ auf.

2. Löse

$$\begin{pmatrix} A + \alpha N(v) & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (A + \alpha N(v))v + B^T p - b \\ Bv - c \end{pmatrix}.$$

3. $v- = w$, $p- = q$.

Die Implementierung findet man in der Klasse `FixedPtDefectCorrCL`, deren abgeleitete Klassen konkrete Stokes-Löser aus `num/stokessolver.h` verwenden.

Nach Turek (Seite 187 ff.) kann man obige Defektkorrektur dämpfen. Diese Variante des Fixpunktverfahrens wird durch die Klasse `AdaptFixedPtDefectCorrCL` implementiert.

7 Zeitintegration

Die Verfahren zur Lösung zeitabhängiger Gleichungen befinden sich in der Erprobung und haben noch keinen festen Platz in der DROPS-Verzeichnishierarchie. In `poisson`, `stokes` und `navstokes` gibt es je eine Datei `integrtime.h`, die stets ein Theta-Schema enthält.

7.1 θ -Schema

Diese Verfahren ergeben sich dadurch, daß man in der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$u_t = F(u)$$

die Terme durch folgende Approximationen ersetzt:

$$u_t \approx \frac{(1 - \theta)u^{\text{alt}} + \theta u^{\text{neu}}}{dt}$$

sowie

$$F(u) \approx (1 - \theta)F(u^{\text{alt}}) + \theta F(u^{\text{neu}}).$$

Man erhält für jeden Zeitschritt ein (nicht-) lineares Gleichungssystem. Bei den Stokes- bzw. Navier-Stokes-Gleichungen wird der Druck stets vollimplizit diskretisiert. Auf diese Weise wird die Berechnung eines Startwertes für den Druck vermieden.

Die Klassen `Instat***ThetaSchemeCL` enthalten eine Funktion `SetTimeStep`, die vor jedem Zeitschritt aufgerufen werden muß. Sie stellt das Gleichungssystem mit der Massenmatrix auf und setzt die Zeitschritt-Größe. Der eigentliche Zeitschritt wird durch einen Aufruf von `DoStep` durchgeführt.

7.2 Fractional-Step-Verfahren

Für die Stokes-Gleichungen ist ein weiteres Verfahren verfügbar: (XXX beschreiben. Ist im Moment defekt...)

8 out: Ausgabe

8.1 Ausgabe in Geomview

- `GeomMGOutCL`: nur Triangulierung ausgeben.
- `GeomSolOutCL`: Triangulierung ausgeben, die nach den Werten einer skalaren Variable eingefärbt ist.

```

class GeomMGOutCL : public MGOutCL
{
    GeomMGOutCL (const MultiGridCL& MG, int TriLevel=-1, bool onlyBnd=false, double explode=0.5);
};

template <class DiscSol>
class GeomSolOutCL : public MGOutCL
{
    GeomSolOutCL (const MultiGridCL& MG, const DiscSol& discsol, const ColorMapperCL* colmap, int TriLevel=-1,
        bool onlyBnd=false, double explode=0.5, double min=0., double max=1.);
};

```

Mit `onlyBnd=true` werden nur die am Rand liegenden Tetraeder ausgegeben (schnellerer Aufbau von Postscript-Bildern!). Über den Parameter `explode` kann der Versatz der Tetraeder untereinander gesteuert werden, bei `explode=0` ist dieser Effekt ausgeschaltet. Die Parameter `min`, `max` geben an, ab welchen Grenzen die Werte der dargestellten Lösung geclippt werden sollen.

Die Geomview-Ausgabe ist vor allem für die Ausgabe der Geometrie und Triangulierung geeignet. Um Lösungen zu betrachten, sollten die folgende TecPlot- (für 2D-Daten) oder Ensight-Ausgabe (für 3D-Daten) genutzt werden.

8.2 Ausgabe in TecPlot

- `TecPlot2DSolOutCL`: Ausgabe von Druck und Geschwindigkeit in einer Schnittebene senkrecht zu einer der Koordinatenachsen.
- `TecPlotSolOutCL`: Ausgabe von Druck und Geschwindigkeit im gesamten Gebiet. Da Tecplot zur 3D-Visualisierung nicht so geeignet ist, empfiehlt sich anstattdessen eine Ausgabe für Ensight!

```

template <class DiscVelT, class DiscPrT>
class TecPlot2DSolOutCL: public MGOutCL
{
    TecPlot2DSolOutCL( const MultiGridCL& mg, const DiscVelT& v, const DiscPrT& p,
        const IdxDescCL& freeVertIdx, int lvl, Uint cutvar, double cutplane);
};

template <class DiscVelT, class DiscPrT>
class TecPlotSolOutCL: public MGOutCL
{
    TecPlotSolOutCL( const MultiGridCL& mg, const DiscVelT& v, const DiscPrT& p, int lvl= -1);
};

```

Die Klasse `TecPlot2DSolOutCL` benötigt zur Nummerierung der Knoten einen Index, in dem alle P_1 -Freiheitsgrade durchnummeriert sind. Dieser wird nicht verändert, es kann also z.B. auch der Index der Druckvariable hierzu benutzt werden. Hier ein Beispiel zur Benutzung:

```

DROPS::IdxDescCL tecIdx;
tecIdx.Set( 1);
Stokes.CreateNumberingPr( mg.GetLastLevel(), &tecIdx);

std::ofstream v2d("data2D.dat");
DROPS::TecPlot2DSolOutCL< MyStokesCL::DiscVelSolCL, MyStokesCL::DiscPrSolCL>
    tecplot2d( mg, prob.GetVelSolution(), prob.GetPrSolution(), tecIdx, -1, 1, 0.5); // cutplane is y=0.5
v2d << tecplot2d;
v2d.close();

```

8.3 Ausgabe in Ensight

`EnightP2SolOutCL`: Ausgabe im Ensight-Case-Format, auch transiente Daten möglich.

```

class EnsightP2SolOutCL
{

```

```

EnsigntP2SolOutCL( const MultiGridCL& mg, const IdxDescCL* idx, bool binary=true);
// call CaseBegin() before any other member function
void CaseBegin ( const char casefileName[], Uint numsteps= 0);
void DescribeGeom ( const char geoName[], std::string fileName, bool timedep= false);
void DescribeScalar( const char varName[], std::string fileName, bool timedep= false);
void DescribeVector( const char varName[], std::string fileName, bool timedep= false);
void putGeom      ( std::string, double t= -1);
template<class DiscScalT>
void putScalar    ( std::string, const DiscScalT&, double t= -1);
template<class DiscVecT>
void putVector    ( std::string, const DiscVecT&, double t= -1);
void Commit      (); // rewrites case file
// call CaseEnd() after finishing all other output
void CaseEnd     ();
};

```

Die Klasse **EnsigntP2SolOutCL** benötigt einen eigenen Index, in dem alle P_2 -Freiheitsgrade durchnummeriert sind. Die Aufrufe von Elementfunktionen werden durch **CaseBegin** am Anfang und **CaseEnd** am Ende eingeschlossen. Beachte, dass das Case-File in der Regel fehlerhaft sein wird, wenn **CaseEnd** nicht aufgerufen wird. Die Funktionen **DescribeXXX** dienen zur Beschreibung der Geometrie und skalarer oder vektorwertiger Variablen und werden einmal zu Anfang aufgerufen. Der Parameter **timedep** gibt dabei an, ob es sich um transiente Daten handelt. Mit den Funktionen **putXXX** können die Daten dann tatsächlich abgespeichert werden. Bei transienten Daten muss dabei noch der entsprechende Zeitpunkt angegeben werden. Sind alle Daten für einen Zeitschritt geschrieben, so sollte **Commit** aufgerufen werden, um den Zeitschritt im case-file eintragen zu lassen. Somit können die bereits berechneten Zeitschritte visualisiert werden, während die übrige Rechnung noch läuft. Die Daten werden standardmäßig im binären Format abgespeichert, durch Setzen des entsprechenden Konstruktorparameters **binary** kann auch auf ASCII-Ausgabe umgeschaltet werden.

Hier ein Beispiel zur Ausgabe von transienten skalaren Daten bei festem Gitter und festem Geschwindigkeitsfeld:

```

IdxDescCL lidx;
lidx.Set( 1, 1);
lset.CreateNumbering( mg.GetLastLevel(), &lidx);
EnsigntP2SolOutCL ensight( mg, &lidx);

const char datgeo[] = "ensight/drop.geo",
          datvec[] = "ensight/drop.vec",
          datscl[] = "ensight/drop.scl";

ensight.CaseBegin ( "drop.case", num_steps+1);
ensight.DescribeGeom ( "rotating vel field", datgeo);
ensight.DescribeScalar( "Levelset", datscl, true);
ensight.DescribeVector( "Velocity", datvec);

ensight.putGeom( datgeo);
ensight.putVector( datvec, prob.GetVelSolution());
ensight.putScalar( datscl, lset.GetSolution(), 0);

for (int i=1; i<=num_steps; ++i)
{
    // berechne Loesung zum neuen Zeitschritt
    // ...
    ensight.putScalar( datscl, lset.GetSolution(), i/10.);
    ensight.Commit();
}

ensight.CaseEnd();

```

8.4 Einlesen von bereits berechneten Daten im Ensignt-Format

ReadEnsigntP2SolCL: Einlesen eines bereits berechneten Datensatzes zur Fortführung einer abgebrochenen Rechnung.

```

class ReadEnsigntP2SolCL

```

```

{
    private:
        const MultiGridCL* _MG;

        void CheckFile( const std::ifstream& ) const;

    public:
        ReadEnightP2SolCL( const MultiGridCL& mg, bool binary=true)
            : _MG( &mg) {}

        template<class BndT>
        void ReadScalar( const std::string&, VecDescCL&, const BndT&) const;
        template<class BndT>
        void ReadVector( const std::string&, VecDescCL&, const BndT&) const;
};

```

Die Klasse `ReadEnightP2SolCL` liest die Werte aus den Dateien `XXXX.scl`, `XXXX.pr` und `XXXX.vel` ein. Es ist also nötig, die Dateien im Enight-Verzeichnis, die den fortzusetzenden Zeitschritt beschreiben, dementsprechend umzubenennen. Es ist zu beachten, dass die Geometriedaten *nicht* ausgelesen werden. Um ein zu den abgespeicherten Daten passendes Gitter muss man sich also selber kümmern². Sollen die Daten aus den Dateien eingelesen werden, so ist der Parameter `InitialCond` in der benutzten `.param`-Datei auf den Wert 3 zu setzen. Man beachte, dass die bereits berechneten Werte durch die Werte der fortsetzenden Rechnung überschrieben werden. Die Funktionen `ReadScalar` und `ReadVector` lesen die entsprechenden Größen und die Randbedingungen des Problems ein. Dabei ist zu beachten, dass diese Funktionen eine Datei im Binärformat erwarten, solange der Parameter `binary` nicht auf `false` gesetzt wird. Hier ein Beispiel zur Anwendung:

```

ReadEnightP2SolCL reader( MG,false);
reader.ReadVector( C.IniData+".vel", Stokes.v, Stokes.GetBndData().Vel);
reader.ReadScalar( C.IniData+".pr", Stokes.p, Stokes.GetBndData().Pr);
reader.ReadScalar( C.IniData+".scl", lset.Phi, lset.GetBndData());

```

8.4.1 Implementierungsdetails

Die Ausgabe `EnightP2SolOutCL` wurde um die Möglichkeit erweitert, die Ausgabe im binären Format stattfinden zu lassen. Dazu wurde der Konstruktor der Klasse um den Parameter `binary` erweitert, dessen default-Wert `true` ist. Innerhalb der Funktionen `putGeom`, `putScalar` und `putVector` werden dann die errechneten Wert mit Hilfe der unions

```

union showInt
{
    int i;
    char s[sizeof(int)];
};

union showFloat
{
    float f;
    char s[sizeof(float)];
};

```

in characters umgewandelt. Nach der Umwandlung werden die Daten wie gewohnt in einen `ofstream` geleitet. Enight akzeptiert die Daten nur als *floats*, d.h. beim evtl. Wiedereinlesen der Daten in DROPS ist mit einem geringen Genauigkeitsverlust zu rechnen. Für den Fall, dass `binary` den Wert `false` hat, wird die ursprüngliche ASCII-Ausgabe verwendet.

²ToDo: Das Multigrid sollte abgespeichert und wieder eingelesen werden können. Das Enight-Geometrieformat ist dazu allerdings nicht geeignet (keine Abspeicherung der verschiedenen Levels möglich).

Natürlich wurden auch entsprechende Änderungen an der Klasse `class ReadEnightP2SolCL` vorgenommen, d.h. der Konstruktor wurde ebenfalls um einen Parameter `binary` ergänzt. Nach dem Einlesen der Daten erfolgt wieder die Umwandlung über unions.

Es ist im Übrigen wohl nicht möglich, die Geometrie-Datei im binären Format und die Daten auf dem Gitter im ASCII-Format zu lesen/schreiben, da nur in der Geometrie-Datei das Flag `C binary` für Enight gesetzt werden darf.

9 misc: Verschiedenes

9.1 Einlesen von Parameterdaten

Zum Einlesen von Parameterdaten aus Dateien wird die Klasse `ReadParamsCL` aus `misc/params.h` zur Verfügung gestellt. Das Einlesen von Parametern der Typen `int`, `double`, `Point3DCL` und `string` wird damit stark vereinfacht.

```
class ReadParamsCL
{
public:
    ReadParamsCL() {}

    // register parameters
    void RegInt ( int&,      string);
    void RegDouble( double&,  string);
    void RegCoord ( Point3DCL&, string);
    void RegString( string&,  string);

    // build groups (may be used recursively)
    void BeginGroup( const string& group);
    void EndGroup();

    // IO
    void ReadParams( std::istream&);
    void WriteParams( std::ostream&) const;

    //cleanup
    void Clear(); // deallocate memory
};
```

Vor Einlesen der Datei mit `ReadParams` müssen die einzelnen Parameter mit Hilfe der Elementfunktionen `RegXXX` registriert werden. Die Parameter können dabei mit Hilfe von Gruppen geordnet werden, die auch geschachtelt sein dürfen. Beispiel:

```
ReadParamsCL rp;
rp.BeginGroup("Solver");
    rp.BeginGroup("Stokes");
        rp.RegDouble( outer_tol, "Tol");
        rp.RegInt( outer_iter, "Iter");
    rp.EndGroup();
rp.BeginGroup("Levelset");
    rp.RegDouble( lset_tol, "Tol");
    rp.RegInt( lset_iter, "Iter");
rp.EndGroup();
rp.EndGroup();
```

Z.B. ist nun `lset_tol` unter dem Namen `Solver:Levelset:Tol` registriert. Eine entsprechende Parameterdatei könnte so aussehen:

```
# Dies ist ein Kommentar.
Solver
{
    Levelset {
        Tol = 1e-8 # Genauigkeit
        Iter = 1000 # max. Anzahl Iterationen
    }
}
```

```

    }
    Stokes {
        Tol = 1e-6
        Iter = 100
    }
}

```

Alle Zeichen hinter einem `#` werden bis zum Zeilenende ignoriert. Statt Gruppen zu bilden, hätte man auch die Parameter direkt ansprechen können, z.B. `Solver:Levelset:Tol = 1e-8`.

Üblicherweise werden alle Parameter für ein Hauptprogramm in einer Klasse zusammengefasst, die von der `ParamBaseCL` (`misc/params.h`) abgeleitet ist. Diese enthält ein `ReadParamsCL`-Objekt; Lesen und Schreiben der Parameter erfolgt (nach deren Registrierung) über den Eingabe-/Ausgabeoperator `>>` bzw. `<<`.

```

class ParamBaseCL
{
protected:
    ReadParamsCL rp_;

public:
    void Clear() { rp_.Clear(); } // cleanup

    friend std::istream& operator >> ( std::istream&, ParamBaseCL&);
    friend std::ostream& operator << ( std::ostream&, const ParamBaseCL&);
};

```

Ein Beispiel für konkrete Parameterklassen findet sich z.B. in `levelset/params.h`. Die Bedeutung der Parameter ist in Anhang [C](#) erläutert.

A Durchführen einer Simulation mit DROPS

A.1 Erste Schritte: Übersetzung des Quelltextes

Zunächst muss in der Datei `drops.conf` im DROPS-Rootverzeichnis die verwendete Rechnerarchitektur eingetragen werden (z.B. `ARCH=LINUX`). Die Compilereinstellungen erfolgen dann in der Datei `arch/<Architektur>/mk.conf`.

Im DROPS-Rootverzeichnis befindet sich das top-level-Makefile. Zu dessen Benutzung muss GNU Make installiert sein. Mit `make <rule>` bzw. `gmake <rule>` wird die entsprechende Regel ausgeführt, wobei `<rule>` für eine der folgenden Regeln steht:

<code>dep</code>	erzeugt automatisch die Abhängigkeiten und legt ein entsprechendes dependency-file an.
<code>all</code>	erzeugt alle ausführbaren Programme in DROPS.
<code>doc</code>	legt eine html-Dokumentation an (mit doxygen).
<code>stat</code>	listet eine Statistik aller Dateien auf.
<code>clean</code>	löscht alle Objektdateien sowie alle ausführbaren Dateien.
<code>distclean</code>	wie <code>clean</code> , löscht zusätzlich alle Dateien mit Endungen <code>.off</code> , <code>.dat</code> sowie <code>geom/topo.cpp</code> , das dependency-file und die Dokumentation.

Zunächst müssen die Abhängigkeiten mit

```
make dep
```

erzeugt werden. Erst dann kann das eigentliche Kompilieren beginnen.

In den jeweiligen Unterverzeichnissen befinden sich die lokalen Makefiles. Diese verstehen als Regeln

- `all`, `clean`, `distclean`, die im jeweiligen Verzeichnis wirken,
- `dep`, `doc` rufen die entsprechende Regel des top-level-Makefiles auf,
- sowie die jeweiligen Namen der executables und Objektdateien in diesem Verzeichnis.

A.1.1 Hinweise für die DROPS-Entwickler:

Damit die automatische Generierung der Abhängigkeiten funktioniert, müssen im Quelltext alle eingebundenen DROPS-Header-Files *immer* mit Pfadangabe versehen sein (auch wenn das Header-File im selben Verzeichnis steht!). Also muss z.B. in `geom/boundary.cpp` stehen:

```
#include "geom/boundary.h"
```

statt

```
#include "boundary.h"
```

Wenn sich die Abhängigkeiten geändert haben, können diese automatisch mit Hilfe des top-level-Makefiles neu erzeugt werden: Dazu muss im DROPS-Rootverzeichnis der Befehl

```
make dep
```

ausgeführt werden.

Wenn neue executables hinzugekommen sind, müssen diese im jeweiligen lokalen Makefile eingetragen werden, indem sie der Variablen `EXEC` hinzugefügt werden und eine neue Regel zum Linken des executable angelegt wird.

Referenzen:

- How to write a Makefile: http://vertigo.hsrl.rutgers.edu/ug/make_help.html
- GNU Make: <http://www.gnu.org/manual/make/index.html>

A.2 Starten einer Rechnung

Nachdem die ausführbare Datei erzeugt wurde, editiert man die Parameterdatei, um die Rechnung den experimentellen Gegebenheiten anzupassen, siehe dazu Anhang C. Der Aufruf des Programms heisst dann: `./<executable> <Kürzel>.param`. Einige der executables verwenden keine Parameterdateien, sondern übernehmen direkt Kommandozeilenparameter.

Erfolgt eine Ensight-Ausgabe der berechneten Daten zur Visualisierung der Lösung, muss dafür Sorge getragen werden, dass im Arbeitsverzeichnis ein Verzeichnis angelegt wird mit dem Namen, der in der Parameterdatei unter `EnsigntDir` angegeben ist. Geschieht dies nicht, so bricht eine durchzuführende Rechnung kurz nach Beginn ab (wenn zum ersten Mal Ensight-Daten geschrieben werden sollen). Da das von Ensight benötigte `.case-File` während der Rechnung laufend aktualisiert wird, kann auch bei noch laufender Rechnung auf die bereits berechneten Daten zugegriffen werden.

B Mit GAMBIT Gitter für DROPS erzeugen

Bei der Erstellung eines Gitters mit GAMBIT sind folgende Punkte zu beachten, damit das Gitter samt Randbedingungen korrekt mit der `ReadMeshBuilderCL` (s. Abschnitt 1.3.4) eingelesen werden kann:

- Den Volumenkörper des Rechengebietes konstruieren.
- FLUENT/UNS im Solver-Menü auswählen, damit die benötigten Randbedingungen zur Verfügung stehen.
- Rand-Faces mit entsprechenden Randbedingungen versehen:

Gambit-Randbedingung	DROPS-Randbedingung	Einsatz
wall	Dir0BC, WallBC	hom. Dirichlet-RB, Wandhaftung
velocity-inlet	DirBC	inhom. Dirichlet-RB, Inflow
outflow	Nat0BC, OutflowBC	hom. natürliche RB, Outflow
pressure-inlet	NatBC	inhom. natürliche RB
periodic	Per1BC	periodische RB, nicht getestet!
periodic-shadow	Per2BC	periodische RB, nicht getestet!

Bitte beachten: Da bislang noch kein Gitter mit periodischen RB mit Gambit erzeugt wurde, liegen hier noch keine Erfahrungen vor...

- Volumen-Gitter erzeugen. Evtl. vorher 2D-Oberflächengitter der kritischen Rand-Faces erzeugen, falls 3D-Meshen fehlschlagen sollte.
- Mesh exportieren.

C Parameter Files

C.1 Stokes Flow, zweiphasig

```
#####
#   DROPS parameter file
#   simulation of two-phase flow:
#   droplet in measuring cell used in NMR measurements
```

```

#=====

# time stepping
Time {
  NumSteps = 500
  StepSize = 1e-4
  Theta = 0.5 # Crank-Nicholson
}

# flow solver
Stokes {
  InnerIter = 1000
  OuterIter = 200
  InnerTol = 1e-14
  OuterTol = 1e-10
}

# levelset solver
Levelset {
  Tol = 1e-14
  Iter = 10000
  SD = 0.1
  CurvDiff = 5e-9
  VolCorrection = 1
}

# re-initialization of levelset function
Reparam {
  Freq = 0 # 0 = no reparametrization
  NumSteps = 5
  StepSize = 0.001
  Diffusion = 1e-4
}

# material data, all units are SI
Mat {
  DensDrop = 955
  ViscDrop = 2.6e-3
  DensFluid = 1107
  ViscFluid = 1.2e-3
  SmoothZone = 1e-4

  SurfTension = 0
}

# experimental conditions
Exp {
  RadDrop = 1.75e-3
  PosDrop = 0 -8e-3 0

  Gravity = 0 -9.81 0

  FlowDir = 1 # flow in y-direction

  InflowVel = -0.1
  RadInlet = 3.5e-3
}

# miscellaneous

NumDropRef = 2
CouplingSteps = -1 # -1 = till convergence

MeshFile = gambit/NMR_klein_grob.msh
EnsignCase = NMRmzi
EnsignDir = ensight

```

Bedeutung der Parameter:

Time:NumSteps > 0

Anzahl der Zeitschritte.

Typ: int

Time:StepSize > 0 **Typ:** double

Größe des Zeitschrittes.

Time:Theta $\in [0, 1]$ **Typ:** double

steuert die Implizitheit des θ -Schemas. Für **Theta=0** erhält man das explizite Eulerverfahren, für **Theta=1** erhält man das implizite Eulerverfahren und für **Theta=0.5** das Crank-Nicholson-Verfahren.

Stokes:InnerIter ≥ 0 **Typ:** int

Maximale Iterationszahl des inneren Löser.

Stokes:OuterIter ≥ 0 **Typ:** int

Maximale Iterationszahl des äußeren Löser.

Stokes:InnerTol > 0 **Typ:** double

Abbruchkriterium für den inneren Löser: Ist das erreichte Residuum kleiner als die vorgegebene Toleranz **InnerTol**, so wird die Iteration abgebrochen. *Hinweis:* **InnerTol** sollte einige Größenordnungen kleiner als **OuterTol** gewählt werden, da sonst der äußere Löser divergiert.

Stokes:OuterTol > 0 **Typ:** double

Abbruchkriterium für den äußeren Löser: Ist das erreichte Residuum kleiner als die vorgegebene Toleranz **OuterTol**, so wird die Iteration abgebrochen. Die Impuls- und Massenerhaltungsgleichung werden also bis zu diesem Residuum gelöst.

Levelset:Iter ≥ 0 **Typ:** int

Maximale Iterationszahl des Levelset-Löser. Dies ist ein GMRES-Löser, der für die Lösung der Gleichungen eingesetzt wird, die die Levelset-Funktion als Unbekannte enthalten: Dies sind die Advektionsgleichung, die Reparametrisierungsgleichung und die Glättung zur Krümmungsberechnung.

Levelset:Tol > 0 **Typ:** double

Abbruchkriterium für den Levelset-Löser. Ist das erreichte Residuum kleiner als die vorgegebene Toleranz **Tol**, so wird die Iteration abgebrochen.

Levelset:SD > 0 **Typ:** double

steuert die Stabilisierung der Advektionsgleichung mit *streamline diffusion*. **SD=0** bedeutet keine Stabilisierung. Ein typischer Wert zur Stabilisierung ist **SD=0.1**.

Levelset:CurvDiff $\ll 1$ **Typ:** double

Bei starken Oberflächenspannungen ist es ratsam, zur Berechnung des Krümmungsterms eine geglättete Levelset-Funktion zu verwenden. Ein typischer Wert ist **CurvDiff=1e-8**. Ist **CurvDiff** ≤ 0 , so erfolgt keine Glättung. *Hinweis:* Die Glättung erfolgt nur für eine temporäre Variable, die zur Krümmungsberechnung verwendet wird; die eigentliche Phasengrenze wird nicht verändert.

Levelset:VolCorrection $\in \{0, 1\}$ **Typ:** bool

schaltet die Volumenkorrektur an (**VolCorrection=1**) oder aus (**VolCorrection=0**). Die Korrektur

ist global, d.h. das Gesamtvolumen bleibt über der Zeit konstant. Die Korrektur erfolgt nach jedem Zeitschritt sowie nach jeder Reparametrisierung der Levelset-Funktion.

Reparam:Freq ≥ 0 **Typ:** int

gibt an, nach wievielen Zeitschritten jeweils die Levelset-Funktion reparametrisiert werden soll. **Freq=0** schaltet die Reparametrisierung ab.

Reparam:NumSteps > 0 **Typ:** int

Bei der Reparametrisierung wird eine Transportgleichung in der künstlichen Zeit τ gelöst. **NumSteps** legt die Anzahl der Zeitschritte fest.

Reparam:StepSize > 0 **Typ:** double

StepSize legt die Größe des Zeitschrittes $\Delta\tau$ fest. Wird bis zum Zeithorizont $\tau_f = \text{NumSteps} \cdot \text{StepSize}$ gelöst, so ist die Levelset-Funktion in einem Streifen der Breite τ_f um die Phasengrenze herum wieder eine Abstandsfunktion (jedenfalls theoretisch ;-).

Reparam:Diffusion ≥ 0 **Typ:** double

Zusätzliche Diffusion bei der Reparametrisierung bewirkt eine Glättung der Phasengrenze. **Diffusion** steuert den Anteil des diffusiven Terms gegenüber dem konvektiven Term.

Mat:DensDrop > 0 **Typ:** double

Dichte des Tropfens in $kg \cdot m^{-3}$.

Mat:ViscDrop > 0 **Typ:** double

Dynamische Viskosität des Tropfens in $kg \cdot s^{-1} m^{-1}$ or $Pa \cdot s$.

Mat:DensFluid > 0 **Typ:** double

Dichte des umgebenden Fluids in $kg \cdot m^{-3}$.

Mat:ViscFluid > 0 **Typ:** double

Dynamische Viskosität des umgebenden Fluids in $kg \cdot s^{-1} m^{-1}$ or $Pa \cdot s$.

Mat:SurfTension ≥ 0 **Typ:** double

Oberflächenspannung in $kg \cdot s^{-2}$ oder N/m .

Mat:SmoothZone ≥ 0 **Typ:** double

Der Sprung von Viskosität und Dichte wird an der Phasengrenze numerisch geglättet, so dass ein Übergangsbereich der Breite **SmoothZone** rund um die Phasengrenze entsteht.

Exp:RadDrop **Typ:** double

Radius des kugelförmigen Tropfens in m zum Anfangszeitpunkt. *Hinweis:* Ist **RadDrop** negativ, so wird die Strömung des Fluids ohne Tropfen berechnet.

Exp:PosDrop**Typ:** Point3DCL

Mittelpunktposition des kugelförmigen Tropfens in m zum Anfangszeitpunkt.

Exp:Gravity**Typ:** Point3DCL

Wirkungsrichtung und Stärke der Schwerkraft in $kg \cdot m \cdot s^{-2}$.

Exp:FlowDir $\in \{0, 1, 2\}$ **Typ:** int

Richtung der Strömung am Einfluss. **InflowDir**=0/1/2 bezeichnen jeweils die x -/ y -/ z -Richtung. Fließt die Strömung in *negative* Koordinatenrichtung, so muss beim Parameter **Exp:InflowVel** ein negatives Vorzeichen gewählt werden.

Exp:InflowVel**Typ:** double

Einströmgeschwindigkeit in $m \cdot s^{-1}$.

Exp:RadInlet > 0 **Typ:** double

Radius der kreisförmigen Einlassöffnung in m .

NumDropRef ≥ 0 **Typ:** int

Anzahl der zusätzlichen Verfeinerungen des eingelesenen Gitters im Bereich des Tropfens.

CouplingSteps ≥ -1 **Typ:** int

Maximale Anzahl der Fixpunktschritte zur Kopplung der Levelset- und (Navier-)Stokes-Gleichung. **CouplingSteps**=-1 bewirkt, dass jeweils bis zur Konvergenz der Fixpunktiteration iteriert wird.

MeshFile**Typ:** string

Name der Mesh-Datei, aus der das Gitter eingelesen wird. Dieses muss im Format GAMBIT/FLUENT UNS abgespeichert sein.

EnsignCase**Typ:** string

Name, unter dem die Daten zur Visualisierung mit Ensign in Dateien ausgegeben werden sollen. Das case file liegt im aktuellen Verzeichnis und erhält die Endung **.case**, die übrigen Dateien werden im Verzeichnis **EnsignDir** abgespeichert.

EnsignDir**Typ:** string

Name des Verzeichnisses, in dem die Geometriedaten (Endung **.geom***) und die Variablen in Dateien abgelegt werden (Endung **.pr*** für Druck, **.vec*** für Geschwindigkeit, **.scl*** für Levelset).

C.2 Navier-Stokes Flow, zweiphasig

Folgende Parameter kommen gegenüber dem Stokes Flow hinzu:

```
NavStokes {
  Nonlinear = 0.5
```



```

Scheme = 0 # Baensch
NonlinearStat = 0
ThetaStat = 0.5
}

```

Bedeutung der Parameter:

NavStokes:Nonlinear $\in [0, 1]$ **Typ:** double

Koeffizient vor dem nichtlinearen Term, um die Stärke der Nichtlinearität beeinflussen zu können. Bei **Nonlinear=0** erhält man die Stokes-Gleichung, bei **Nonlinear=1** wird die volle Navier-Stokes-Gleichung gelöst.

NavStokes:Scheme $\in \{0, 1\}$ **Typ:** int

bestimmt das Zeitintegrationsschema für die Lösung der instationären Navier-Stokes-Gleichung. **Scheme=1** ist das θ -Schema, was auch zur Lösung der Stokes-Gleichung eingesetzt wird, allerdings mit einem anderen Löser (GMRES, aufgrund des zusätzlichen Terms sind die Matrizen i.A. nicht mehr symmetrisch). Robuster ist das modifizierte fractional step scheme (siehe BÄNSCH), das bei **Scheme=0** gewählt wird.

...