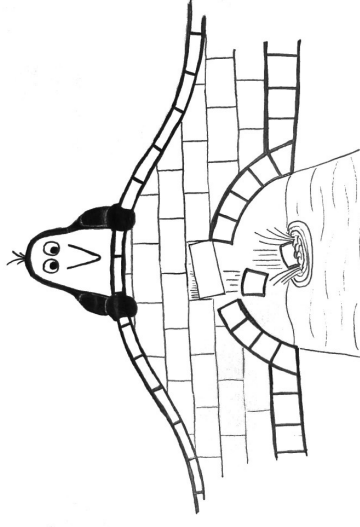


Termine

- Im Juli finden am LRZ mehrere Kurse zum Themenbereich "Effiziente Programmierung, Parallelisierung und Programmierung für Intel Cluster" statt. Nähere Informationen und Anmeldung unter <http://www.lrz.de/services/compute/hlrb/kurse/>.
 - Am 6. & 7. Oktober findet das gemeinsame Ergebniseminar von LRZ/HLRB und HLRS in Stuttgart statt.
 - Vom 6.–9. Okt. findet an der TUM in Garching der KONWIHR Kurzlehrgang "Numerische Methoden zur Lösung von Ingenieurproblemen in der Strömungs- und Strukturmechanik" statt.
 - Vom 13.–15. Oktober findet am RRZE der Kurs "Programming and Optimization Techniques for Parallel Computers" statt. Am 16. Oktober werden Fortran 90 Fragestellungen erörtert.
 - Ebenfalls vom 13.–16. Oktober findet am LSTM-Erlangen der Kurzlehrgang "Methoden der Strömungsmechanik und ihre Anwendung in der Durchflussmesstechnik" statt.
 - Am 25. Oktober findet im Großraum Erlangen-Nürnberg eine "Lange Nacht der Wissenschaften" statt. KONWIHR wird im zentralen Hörsaal-Gebäude am Roten Platz der Technische Fakultät unter dem Motto "Supercomputer in Wissenschaft und Technik" auftreten. Beiträge aus den Projekten werden noch dringend gesucht.
 - Am 27. Oktober findet in der Pinakothek der Moderne in München der Festakt "10 Jahre Forschungsverbünde in **abayfor**" statt. KONWIHR wird als Teil von **abayfor** natürlich dabei auch vertreten sein.
- ## Bitte notieren:
- Verlängerungsanträge für KONWIHR Projekte können bis **1.9.2003** bei einer der Geschäftsstellen eingereicht werden. Die nächste **Sitzung des KONWIHR-Beirates** findet am **22.10.2003** in **München** statt. Bei dieser Gelegenheit findet die Begutachtung der abgelaufenen Projekte sowie der Verlängerungsanträge statt. Nähere Informationen werden schriftlich versandt.
-
- ## Impressum
- KONWIHR Quartt***
– das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für technisch-wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen (KONWIHR) – erscheint jeweils zum Quartalende.
- Herausgeber:**
Prof. Dr. A. Bode, Sprecher des KONWIHR,
Prof. Dr. Dr. h.c. F. Durst, stellv. Sprecher
- Redaktion:**
Dipl.-Ing. Th. Zeiser
Lehrstuhl für Strömungsmechanik
Cauerstraße 4, D-91058 Erlangen
Tel./Fax: ++49-9131-85 28280 / 29503
e-mail: konwihrr@lstm.uni-erlangen.de
- Dipl.-Inf. A. Schmidt
Institut für Informatik, TU München
D-85748 Garching bei München
Tel./Fax: ++49-89-289 17680 / 17662
e-mail: konwihrr@in.tum.de
- WWW:**
<http://www.konwihrr.uni-erlangen.de/>
<http://konwihrr.in.tum.de/>
- Druck:**
Digital Print Group, Erlangen
- Redaktionsschluss**
für die nächste Ausgabe: **14.9.2003**
- Nächste Ausgabe des Quartt:**
Oktober 2003
- * **Quartt**: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß, → das **Quart**: 1/4 Kanne = 0.27 l (Brockhaus Enzyklopädie 1972)

Editorial

Da sage noch einer, die Fortentwicklung der deutschen Sprache bestehe nur noch in der Auf- bzw. Übernahme von Fremdwörtern – schließlich gibt es auch genügend urdeutsche Neuschöpfungen. Das Substantiv „Brückentag“ oder das Verb „brücken“ zum Beispiel; Einsatzszenario? „Wo ist der Herr Müller denn heute?“ – „Der brückt!“ Der Duden, heute noch überfordert, wird in ein paar Jahren wohl definieren „einen Brückentag nehmen“, „die Brücke machen“ oder „auf Brücke sein“. Alle Klarheiten beseitigt? Nun, die beliebteste Brücke Deutschlands beginnt typischerweise am Mittwoch Abend und endet am Samstag in der Früh.



Zweimal pro Jahr darf sie im katholischen Süden unserer Republik per Default gebaut werden (wie es uns die bienenfleißige, zwangshanseatisierte ARD-aktuell-Redaktion an Fronleichnam einmal mehr glaubte vorhalten zu müssen). Meint es der Kalender wie in diesem Frühsommer besonders gut mit uns (arbeitsnehmerfreundlich nennt sich das), kommt noch die eine oder andere Gelegenheit dazu – wer hat sie nicht genossen, die „Brücke des Tags der Arbeit“?

In Bayern und ganz besonders in Bayrisch-Schwabens Kapitale mag man sich dagegen nicht so richtig freuen: Mariä Himmelfahrt ein Freitag, das Augsburger Friedensfest ein Freitag – lauter Halbinseln ohne Bedarf an Brücken. So ein Mist aber auch.

Doch auch die klassische Brücke zeigt längst zumindest Damm-Charakter, spricht doch der Verkehrsfunk geradezu selbstverständlich vom verlängerten Fronleichnams-Wochenende. Angesichts der florierenden Brückenkultur (ganz zu schweigen vom ökonomischen Impact mit den vielen aus dem Brückenbau resultierenden Arbeitsplätzen, in der Fremdenverkehrsbranche etwa) müsste man wirklich mal mit den Kirchenoberen reden, ob nicht Osterdienstag und Pfingstdienstag passender wären als die langweiligen Montags-Appendizes. Eine kirchenhistorisch wie kirchenrechtlich sicher ungemein spannende Frage (glatte ein paar theologische Dissertationen wert), die die beiden großen christlichen Kirchen in unserem Lande vielleicht sogar gemeinsam diskutieren dürften, ohne dass ein gewisser Herr aus Polen samt (teils bajuwarischem) Gefolge im Vatikan einen Riesenschreck bekommt. Oder wäre es nicht ein wunderschönes Abschiedsgeschenk unseres wohl bald in höhere Sphären entleuchtenden Bundesaußenministers an die rot-grüne Koalition in Berlin, den Karfreitag als Feiertag abzuschaffen (sehr zur Freude von des Kanzlers Zigarrenkumpels) und im gleichen Atemzug als Kompensation – schließlich schlägt das Herz links – den **Grün**donnerstag zum Feiertag zu erklären? Ganz zu schweigen von der wirtschaftspolitischen Brillanz eines ebenso mutigen wie zukunftsweisenden Schritts!

Geradezu erschreckend, welche Tragweite unsere kleine Brückenstudie bei ge-
nauem Hinsehen hat. Was, wenn die deutsche Politik seinerzeit standhaft geblieben wäre und am 17. Juni als Tag der deutschen Einheit festgehalten hätte? Um den 3. Oktober wär's nicht schade – eh ein Freitag in diesem Jahr. Die KW 25 aber, die wär so was geworden wie

der US Highway 1 von Key Largo nach Key West, eine Brückenkette (oder Kettenbrücke?) mit freiem Dienstag *und* freiem Donnerstag. Angesichts solch kühner Brückenkonstruktionen hätte die IG Metall im Osten glatt das Streiken vergessen. Wenn es noch eines Beweises der Unfähigkeit unserer Politiker bedurft hat, dann dürfte der angesichts dieses historischen Brückendesasters erbracht sein. Überhaupt werden die Historiker sich bestimmt in Bälde der Brückenfrage annehmen. Guido Knopp bereitet wahrscheinlich längst den Dreiteiler „Hitlers Brücken“ vor – mit völlig neuen Deutungen der Brücken von Arnheim, Remagen und am Kwai.

Weiteren Anschauungsunterricht gibt's wie so oft im Web. Unser öffentlich-rechtliches Fernsehen kommt einmal mehr seinem jede Gebührenerhöhung rechtfertigenden Bildungsauftrag an uns, das bildungshungrige Volk, nach und stellt unter http://online.wdr.de/online/freizeit/bruecken_in_den_urlaub/ einen speziellen Brückentagsplaner zur Verfügung. Zwar nur für 2002 (aus dessen Perspektive die Verlegung des Tags der deutschen Einheit in den Oktober übrigens gar nicht so töricht war!), aber immerhin!

Ach ja, dreimal dürfen Sie raten, wann und wo dieses Editorial entstand. Richtig, an einem Brückentag (dem nach dem katholischen Feiertag mit Prozession und anschließendem Weißwurstessen), allerdings im Büro.

Doch nun: Genießen Sie die neueste Ausgabe des Quartls – einer der wenigen Lichtblicke in einer verflucht langen brückenlosen Zeit!

Hans-Joachim Bungartz

LRZ und RRZE in der TOP500

Das LRZ ist wieder mit zwei Systemen in der neuesten TOP500-Liste der weltweit leistungsstärksten Rechner vertreten (www.top500.org).

Der Höchstleistungsrechner in Bayern (HLRB) nimmt Platz 29 ein und hat sich seit November 2002 „nur“ um zwei Plätze verschlechtert. Im Frühjahr 2002 war der HLRB dagegen noch auf Position 14.

Der neue serielle Teil des Linux-Clusters der Firma MEGWare am LRZ mit seinen Pentium4-Prozessoren mit einer Taktfrequenz von 3 GHz konnte immerhin Platz 353 unter den weltweit schnellsten Systemen erreichen.

Mit dem neuen IA32-Cluster der Firma Transtec AG, das im letzten Quartl bereits vorgestellt wurde, betreibt das RRZE nun auch wieder ein Rechnersystem in Erlangen, das in der Liste der 500 schnellsten Rechner der Welt aufgeführt ist. Der Cluster steht dort nach Maßgabe seiner LINPACK-Benchmarkleistung auf Platz 317.

Quartl-TZ

64bit AMD Opteron Testsystem am RRZE

Seit dem 20. Juni 2003 ist das Regionale Rechenzentrum Erlangen (RRZE) stolzer Besitzer einer 64bit AMD Dual-Opteron Workstation. Die Maschine, die zu Benchmarkzwecken allen KONWIHR Projektpartnern zur Verfügung steht, ist mit 2 1,6 GHz Opteron CPUs, 6 GB Hauptspeicher und 70 GB Festplattenplatz ausgestattet. Eine CPU verfügt über jeweils 64 kB L1-Instruktions- und Datencache, sowie über 1 MB L2 Cache. Die Bandbreite zum Hauptspeicher beträgt je CPU 4,3 GB/s (266 MHz DDR DRAM), zwischen den CPUs kann mit 6,4 GB/s kommuniziert werden. Werden

333 MHz DRAM Speicherriegel verwendet, kann die Bandbreite sogar bis auf 6,4 GB/s gesteigert werden. Beim Betriebssystem fiel die Wahl auf den SuSE Linux Enterprise Server. Die installierte Compiler-Suite der Portland Group, der NAG-Compiler sowie die GNU-Compiler bieten dabei eine breite Palette an aktuellen Compilern.

Die ersten Benchmarkergebnisse zeigen auch gleich das Potenzial dieser Architektur auf. Während im Bereich der Integerarithmetik hervorragende Ergebnisse erzielt werden, bleibt die Gleitkommaleistung erwartungsgemäß hinter der des größten Konkurrenten im 64bit Bereich, Intel Itanium2, zurück. Diese Unterschiede können sich je nach Benchmark in einem Faktor 2 in die jeweilige Richtung ausdrücken. Angesichts des erheblich niedrigeren Preises des Opterons (ca. Faktor 3) ist diese Architektur damit als durchaus interessant einzustufen.

Der große Vorteil des AMD stellt sicherlich die Fähigkeit dar, im sog. „mixed-mode“ sowohl 32- als auch 64bit Executables ohne weitere Modifikationen nativ ausführen zu können. Dies ist besonders für solche Anwender von Interesse, die auf Grund komplizierterer Implementierungen den Sprung auf 64bit nicht ad hoc wagen können oder wollen.

Was die Stabilität im Betrieb angeht, macht der Opteron ebenfalls einen sehr guten Eindruck. Experimentierfreudige können neben dem standardmäßig installierten Kernel 2.4.19-SMP auch einen NUMA-Kernel verwenden, der Modifikationen im Bereich des Scheduling und der Speicherverwaltung enthält.

Bei Interesse an Benchmarkläufen wenden Sie sich an:

hpc@rrze.uni-erlangen.de

Frank Deserno, HPC@RRZE



18th International Supercomputer Conference KONWIHR/LRZ auf der ISC2003

Wie in der vergangenen drei Jahren war KONWIHR wieder auf dem Stand des LRZ auf der International Supercomputer Conference (ISC2003) in Heidelberg vertreten.

Blickfang war die Demonstration der interaktiven Visualisierung einer Strömungssimulation, die im KONWIHR-Projekt VISimLab entwickelt wird. Wegen der langsamen Netzanbindung war es leider nicht möglich den Visualisierungsrechner mit dem HLRB zu

koppeln (wie ursprünglich geplant). Statt dessen wurde die gesamte Demonstration lokal auf einem 4-Prozessorsystem vorgestellt.

Interessierte Besucher erhielten durch das ausliegende Exemplar des "High Performance Computing in Science and Engineering"-Bandes (der zum "First Joint HLRB and KONWIHR Status and Result Workshop 2002" erschienen ist), die KONWIHR-Faltblätter und weitere Publikationen des LRZ einen Abriss über die auf der Hitachi SR8000-F1 durchgeführten Forschungsprojekte.

Quartl-AS



Petra Hardt (Lehrstuhl für Bauinformatik) und Andreas Schmidt (KONWIHR) vor dem gemeinsamen LRZ/KONWIHR-Stand auf der Internationalen Supercomputing Conference in Heidelberg. Als Demonstration werden Ergebnisse aus dem KONWIHR-Projekt VISimLab "Virtual Reality basierte Interaktive Strömungssimulation mit der Lattice Boltzmann Methode" gezeigt. (Bild: LRZ)

Hitachi SR8000 Nachfolge: HLRB-II Wissenschaftsrat empfiehlt neuen Höchstleistungsrechner für Bayern

Mit Höchstleistungsrechnern wurden in den zurückliegenden Jahren zahlreiche wissenschaftliche Durchbrüche erzielt, die auf Rechnern niedrigerer Leistung nicht möglich gewesen wären. Dies betrifft beispielsweise Simulationen in der Elementarteilchenphysik, in der Materialforschung, Strömungsdynamik, Strukturmekhanik, Chemie, Geo- und Astrophysik sowie Klima- und Umweltforschung. Die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern ist ein entscheidender Standortfaktor im internationalen Wettbewerb.

Auf den Frühjahrssitzungen hat der Wissenschaftsrat eine Empfehlung zur Beschaffung eines Höchstleistungsrechners mit einer Leistung von 40 TFlop/s am LRZ verabschiedet. Die Leistung dieses Rechners lässt sich folgendermaßen beschreiben: Wenn ein Mensch in zehn Sekunden zwei zwölfstellige Zahlen multipliziert, dann müsste das Sechzigtausendfache der Menschen, die auf der Erde leben, diese Multiplikation durchführen, um der Leistung von 40 TFlop/s zu entsprechen. Mit dieser angestrebten Rechenleistung wird der HLRB-II zu den zehn weltweit leistungsstärksten Rechnern gehören.

Die Gesamtkosten des Rechners belaufen sich auf 38 Mio. Euro. Er soll in zwei Ausbaustufen ab 2005 in einem Neubau in München installiert werden und wird bundesweit für Universitäten und außeruniversitäre Forschungseinrichtungen, z.B. Max-Planck-Institute, zugänglich sein. Neben den bisher stärksten Nutzern von Höchstleistungsrechnern in den Disziplinen Physik und Ingenieurwissen-

schaften ist in Zukunft mit einer Zunahme in den Bereichen Chemie, Biowissenschaften und Life Sciences zu rechnen.

Die Empfehlung wurde vom "Nationalen Koordinierungsausschuss zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern" des Wissenschaftsrates vorbereitet. Dieser Koordinierungsausschuss begutachtet alle Anträge auf Einrichtung von Höchstleistungsrechnern und deren infrastrukturelle Peripherie, die für universitäre und außeruniversitäre Einrichtungen gemeinsam aus Fördermitteln des Bundes und der Länder beschafft werden sollen. In diesem Gremium wirken Wissenschaftler aus Universitäten und außeruniversitären Forschungseinrichtungen sowie Vertreter des Bundes und der Länder.

Soweit die LRZ-Pressemitteilung. In der ausführlichen Stellungnahme des Wissenschaftsrates heißt es weiter:

"Eine fachliche Unterstützung der Nutzer von Hoch- und Höchstleistungsrechnern erfolgt durch KONWIHR. Das Land sichert die Unterstützung dieses erfolgreichen Projekts auch während der Betriebszeit des HLRB-II weiter zu und entspricht damit der Empfehlung des Wissenschaftsrates, eine effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern durch die Einrichtung von Kompetenznetzwerken zu fördern. Dieses Projekt ist ein wesentlicher Grund für eine hohe Nutzung des Höchstleistungsrechners durch bayerische Antragsteller. Der Wissenschaftsrat hält das Projekt KONWIHR für sehr produktiv. Er ermuntert entsprechend seiner wiederholt geäußerten Empfehlungen zur Nutzung von Höchstleistungsrechnern die Länder, ebenfalls solche Kompetenznetzwerke einzurichten."

Quartl-TZ

Neues vom FreeWiHR-Projekt

Simulation von Metallschaum mittels der Lattice-Boltzmann Methode

Nils Thürey, Thomas Pohl,
Carolín Körner und Ulrich Rude

Einleitung: Das *FreeWiHR*-Projekt, das vom Lehrstuhl für Werkstoffkunde und Technologie der Metalle und dem Lehrstuhl für Informatik 10 der Universität Erlangen-Nürnberg bearbeitet wird, beschäftigt sich mit der Simulation von Metallschäumen. Da der Produktionsprozess dieser Schäume momentan noch nicht vollständig verstanden ist, sollen mit Hilfe numerischer Simulation neue Erkenntnisse gewonnen, und die Produktionsparameter, wie Druck, Gaskonzentration und die Beschaffenheit des Rohmaterials optimiert werden. Für zweidimensionale Probleme wurden bereits erfolgreich Simulationen durchgeführt [1]. Dieser Artikel beschreibt die Erweiterung des dort vorgestellten Algorithmus für drei Dimensionen – dabei ist momentan der zugrundeliegende Algorithmus implementiert, der für die Simulation der Bewegung der flüssigen Metallphase zuständig ist.

Das Verfahren benutzt die *Lattice-Boltzmann Methode (LBM)* mit einem sog. *D3Q19* Gitter. Im Gegensatz zu anderen Mehrphasen-Algorithmen soll die Gas-Phase jedoch nicht vollständig als Fluid simuliert werden, da sie, abgesehen vom Druck, nur einen vernachlässigbaren Einfluss auf das flüssige Metall hat. Aufgrund der großen Gas-Volumina die in Metallschäumen auftreten, kann dadurch viel Rechenzeit eingespart werden.

Die Grundidee der LBM ist die Simulation des komplexen Verhaltens von Fluiden mit sehr einfachen Regeln, die dennoch im Grenzwert gegen die Lösung

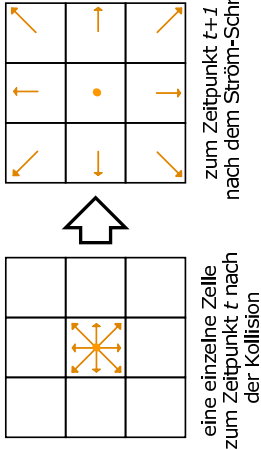


Abbildung 1: Ablauf des Strömungs-Schritts für eine einzelne Zelle eines 2D-Gitters.

der Navier-Stokes-Gleichungen konvergieren [7]. Die zu simulierende Flüssigkeit wird als Gitter aus identischen Zellen repräsentiert, in welchen sich die Flüssigkeitsmoleküle nur entlang bestimmter Richtungen bewegen können. In der hier verwendeten Methode sind 19 Richtungen erlaubt. Ausgehend vom Mittelpunkt eines dreidimensionalen Würfels gibt es ruhende Moleküle und Moleküle die sich in Richtung aller Nachbar-Zellen bewegen, mit Ausnahme der acht Ecken-Nachbarn. Da jede der 19 Richtungen eine feste Länge hat (entweder 0, 1 oder $\sqrt{2}$), sind auch die Geschwindigkeiten der Moleküle festgelegt. Für jede Zelle und Richtung des Gitters wird gespeichert, mit welcher Wahrscheinlichkeit es Moleküle gibt, die sich entlang dieser Richtung bewegen (die *Partikel-Verteilungsfunktionen*). Addiert man alle Verteilungsfunktionen einer Zelle auf, so erhält man durch die Normierung der Zellgröße und Partikelmasse auf 1, die Dichte der Zelle. Ähnlich einfach lässt sich auch die makroskopische Geschwindigkeit einer Zelle ausrechnen. Der Algorithmus besteht nun aus zwei sich wiederholenden Schritten: dem *Strömungs-* und dem *Kollisionen*-Schritt. Beim Strömungs-Schritt werden die Verteilungsfunktionen entlang ihrer Richtung in die Nachbarzellen kopiert, wie in Abbildung 1 dargestellt.

zu Großrechnern aufbauen konnten. Es ist hier somit in erster Linie zunächst noch Überzeugungsarbeit zu leisten, um die Vorteile des Einsatzes von Großrechnern in der anwendungsorientierten Forschung zu demonstrieren. Damit einhergehend muss dem interessierten Anwender ein zentraler, lokaler Ansprechpartner zur Seite gestellt werden, der bei allen Fragen rund um die Programmierung und Nutzung von Supercomputern kompetent zur Seite steht.

Ein effizienter Weg zu diesem Ziel ist die Bündelung der FH-Aktivitäten in einer zentralen Anlaufstelle an der FH-Nürnberg, die auf Technik und Know-How des RRZE als großes universitäres Rechenzentrum zurückgreifen kann. Dieses Service-Projekt kommt den beiden anderen Projektvorschlägen sowie künftigen Aktivitäten unmittelbar zu gute.

Den Hintergrund des zweiten Projekts bildet die Untersuchung und Optimierung von Strömungen flüssiger Metalle und Schmelzen wie sie in verschiedenen technischen Anwendungen oder natürlichen Erscheinungsformen auftreten. Beispiele finden sich in Glasschmelzen, in Kühlkreisläufen von Hochtemperaturreaktoren oder – und dies ist die prototypische Anwendungen des Projekts – in Metallschmelzen während der Kristallzüchtung. Eines der wichtigsten Verfahren in diesem Zusammenhang ist das Czochralski-Verfahren zur Kristallzüchtung aus der Schmelze. In dem Projekt sollen einige der wichtigsten strömungsphysikalischen Effekte in derartigen Schmelzen untersucht werden, wobei sowohl experimentelle als auch numerische Untersuchungsmethoden eingesetzt werden.

Das Ziel des dritten Projekts ist die Untersuchung und Optimierung von Hoch-



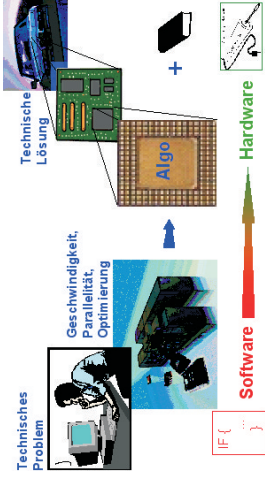
Innovativer Porous Invert Media (PIM) Wärmetauscher

leistungswärmetauschern für unterschiedliche industrielle Anwendungen. Beispiele finden sich im Bereich der Kühlung von hochintegrierten elektronischen Bauteilen, Verdampfungs- und Kondensationseinheiten für Kältschränke im Haushaltsbereich, kompakten Einheiten für die Abwärmenutzung von Dieselmotoren in mobilen Sterilisationsanlagen für Speisereste etc. Eine der wichtigsten Verfahren für die Erstellung von modernen Wärmetauschern mit kompakter Bauweise ist die Intensivierung des Wärmeüberganges durch das Anbringen der hocheffizienten Rippen an den Seiten mit sonst niedrigen Wärmeübergangszahlen. Als besonders wirksam haben sich für diesen Zweck Profile – so genannte “Pins” mit unterschiedlichem Querschnitt erwiesen. Damit die Druckverluste durch die Anwendung solcher Profile nicht die für die Praxis akzeptablen Grenzen überschreiten, sollen im Rahmen des Projektes verstärkt Arbeiten an strömungsgünstigeren Profilen forciert werden. Hochleistungsrechnungen sollen für die Optimierungsrechnungen zur Anwendung kommen.

F. Durst

Kooperationsprojekte FH-Nürnberg – Uni-Erlangen

In den vergangenen Jahren wurden verstärkt Anstrengungen unternommen, um durch die gezielte Bündelung von Kompetenzen aus verschiedenen Disziplinen wie Mathematik, Informatik, Physik, Chemie und Ingenieurwissenschaften an den Hochschulen anwendungsorientierte Forschung vorantreiben zu können. Hierzu gehören Initiativen wie z.B. die Bildung von Forschungsverbünden oder Kompetenznetzwerken. Im Bereich des technisch-wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens wurde dies in Bayern sehr erfolgreich im Forschungsverbund FORTWIHR und in KONWIHR umgesetzt. Obschon diese Initiativen grundsätzlich allen bayerischen Hochschulen und Forschungseinrichtungen zur Verfügung standen, wurden mehrheitlich universitäre Einrichtungen gefördert. Aufgrund ihrer Personalstruktur sowie der stärkeren Ausrichtung auf Lehre und Ausbildung konnten diese Fördermaßnahmen von Fachhochschulen nur in geringerem Maße genutzt werden. Tatsächlich bieten die Fachhochschulen aber durch ihre starke Praxisorientierung, die anwendungsorientierte Forschung und die Überführung von Forschungsergebnissen in industriell verwertbare Prototypen interessante Kooperationsmöglichkeiten. Um die hier vorhandenen exzellenten technischen und human Ressourcen besser im Bereich der Forschung integrieren zu können, bedarf es jedoch gezielter Maßnahmen, die nur durch enge Kooperationen zwischen Fachhochschulen, Universitäten und ggf. Industrieunternehmen realisiert werden können.



Umsetzung der Ergebnisse des KONWIHR-Projekts FPGA (Prof. Urbanek, FH-Nürnberg): vom Großrechner auf Mikrochips

Vor kurzem wurden daher drei Kooperationsprojekte zwischen der Georg-Simon-Ohm Fachhochschule in Nürnberg und der Universität Erlangen-Nürnberg beim Bayerisches Staatsministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst eingereicht, um genau diese Integration anzugehen.

Das Ziel ist es, einen besseren Transfer von modernen Technologien und Methoden aus den Universitäten zu den Fachhochschulen und letztlich in die Industrie hinein zu ermöglichen, um diese einer größeren Ingenieurgemeinde, aber auch Studenten, zur Verfügung zu stellen. Gleichzeitig sollen in räumlicher Nähe vorhandene Anlagen in Erlangen und Nürnberg besser genutzt werden.

Das erste Projekt soll die Infrastruktur und die Kompetenz für das Hochleistungsrechnen aufbauen und bereitstellen, sowie nötige Überzeugungsarbeit leisten. Eines der Ergebnisse von KONWIHR in Bezug auf die Fachhochschulen ist, dass nur wenige Fachhochschulen Großrechner wie den HLRB nutzen konnten, da einerseits Know-How (im Hinblick auf Programmierung und Nutzung) und Infrastruktur in den Fachhochschulen selbst fehlen, andererseits gerade die kleinen Unternehmen als wichtigste Partner der Fachhochschulen keinen Bezug

Das Kopieren der Verteilungsfunktionen entspricht dabei gerade der Bewegung der Moleküle während eines Zeitschritts. Der darauf folgende Kollisions-Schritt verändert nun die Verteilungsfunktionen mit einer einfachen Formel so, dass sie auch die Richtungs- und Geschwindigkeitsänderungen durch Kollisionen mit anderen Molekülen beinhalten. Für die Berechnung sind die Dichte und Geschwindigkeit nötig, die wie oben beschrieben berechnet werden können. Danach folgt wieder ein Strömungsschritt, der die Verteilungsfunktionen in die umliegenden Zellen kopiert.

Der Vorteil der LBM ist vor allem die Möglichkeit einer einfachen, effizienten und parallelen Implementierung. Weiterhin ist die Behandlung von Interaktionen mit festen Wänden als *slip*- oder *no-slip*-Randbedingung einfach und ermöglicht die Simulation von komplizierten Geometrien. Daher bietet sich das Verfahren an, die geometrisch und topologisch komplexe, zeitvariable Situation bei Metallschäumen zu simulieren.

Die freie Oberfläche: Mit der normalen LBM lassen sich nur Bereiche simulieren, die vollständig mit Flüssigkeit gefüllt sind. Zur Unterscheidung der Flüssigkeits- und Gasvolumina wurden drei verschiedene Zelltypen eingeführt:

- *Gaszellen* enthalten keine Flüssigkeit und werden in der LBM nicht berücksichtigt.
- *Flüssigkeitszellen* sind komplett gefüllt und werden während der Simulation wie oben beschrieben behandelt.
- *Interface-Zellen* enthalten sowohl Gas als auch Flüssigkeit und erfordern deshalb eine gesonderte Behandlung.

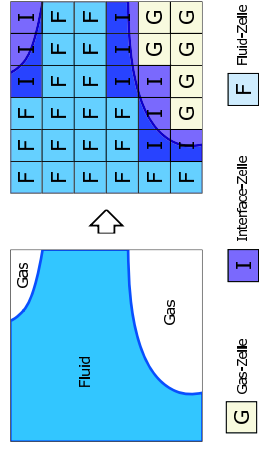


Abbildung 2: Beispiel einer Flüssigkeitskonfiguration und ihre Repräsentation im Gitter.

Die Veränderung der freien Oberfläche und Effekte wie Gasdruck und Oberflächenspannung fließen nur in die Behandlung der Interface-Zellen mit ein. Für die Massenerhaltung ist es wichtig, dass keine Fluid-Zellen mit angrenzenden Gas-Zellen existieren. Im Laufe einer Simulation können sich die Interface-Zellen komplett leeren oder füllen, was einer Masse von 0 bzw. einer Masse gleich einer vollen Zelle entspricht. Daraufhin wird der Typ der Interface-Zelle entsprechend geändert, und die umliegenden Zellen müssen so initialisiert werden, dass wieder eine zusammenhängende Schicht von Interface-Zellen entsteht.

Oberflächenspannung: Die korrekte Berücksichtigung der Oberflächenspannung ist entscheidend für eine physikalisch richtige Simulation. Dazu muss die Krümmung der Oberfläche bei jeder Interface-Zelle ermittelt werden. In 2D lässt sich die Krümmung anhand von drei Punkten auf einer Kurve leicht annähern, indem man den Kreis berechnet, der alle drei Punkte berührt. Damit ist der Radius des Kreises R und somit auch die Krümmung $\sigma = 1/R$ bekannt. Für die Metallschäumsimulation werden zwei, durch rechtwinklige Normalschnitte entstehenden Kurven zur Krümmungsberechnung herangezogen. Die gemittelte Krümmung der beiden Kurven wird dann in der Simulation als Druckverände-

rung bei der Rekonstruktion der Verteilungsfunktionen für Interface-Zellen verwendet. Dadurch wird je nach Vorzeichen der Krümmung eine Kraft in Richtung des Fluids bzw. des Gases auf die Oberfläche ausgeübt. Um die jeweils drei benötigten Punkte auf jeder Kurve zu finden wird der *Marching-Cubes*-Algorithmus verwendet [3].

Ergebnisse und Ausblick: Abbildung 4 zeigt drei Bildreihen von aufsteigenden Blasen verschiedener Größe. Während die kleinste Blase in der oberen Reihe im letzten Zeitschritt die Oberfläche noch nicht durchbrochen hat, haben die größeren Blasen höhere Aufstiegsgeschwindigkeiten und erreichen die Oberfläche. Ein komplizierteres Problem mit sechs aufsteigenden Blasen und Koleszenz ist in Abbildung 5 gezeigt. Die Visualisierungen wurden in beiden Fällen mit einem eigenen Raytracer erstellt, der die vom *Marching-Cubes*-Algorithmus berechneten Oberflächen benutzt [2].

Die hier vorgestellte LBM erlaubt die Simulation und Visualisierung des dynamischen Verhaltens von Flüssigkeiten mit Oberflächenspannung und deren Interaktion mit Gasen. Wie vor allem an den zurückbleibenden Gaseinschlüssen in den Bildern aus Abbildung 5 zu sehen ist, müssen die Randbedingungen für die freie Oberfläche jedoch noch verbessert werden. Vor allem bei größeren Geschwindigkeiten kann es vorkommen, dass einzelne Interface-Zellen nicht schnell genug geleert oder gefüllt werden können. Zur Zeit wird die Simulation erweitert, um auch die Gasdiffusion im flüssigen Metall und dessen Erstarrung zu berücksichtigen. Animationen der hier vorgestellten Ergebnisse und weitere Bilder können auf den folgenden Internetseiten heruntergeladen werden [4, 6].

Höchstleistungsrechnen:

Derzeit existiert in dem Projekt die ursprüngliche 2D-Version des Programms, die sich leider jedoch nicht als Ausgangsbasis eines parallelen 3D-Programms eignet. Deshalb wurde im Rahmen einer Diplomarbeit [5] ein 3D-Programm entwickelt, mit dem das Lattice-Boltzmann-Verfahren auf Strömungen mit freien Oberflächen angewandt werden kann. Dieses Programm ist voll funktionsfähig und wird funktional erweitert.

Gleichzeitig wurde an der Parallelisierung der Verfahren gearbeitet. Das sequentielle Programm aus der Diplomarbeit kann nämlich physikalisch nur sehr kleine Ausschnitte von $ca. 5 \times 5 \times 5$ mm mit noch akzeptablen Rechenzeiten simulieren. Bereits eine Vergrößerung auf einen Schaumwürfel mit 5 cm Kantenlänge würde die erforderliche Rechenzeit auf den schnellsten derzeit erhältlichen PCs auf mehrere Jahre steigern.

Für Simulationen in dieser Größenordnung muss deshalb die aktuell in Entwicklung befindliche parallele Programmversion für die Hitachi SR8000 zum Einsatz kommen. Nach unseren Hochrechnungen wird damit die Rechenzeit für einfache Szenarien wieder auf ca. einen Tag reduziert werden können.

Bei der Entwicklung der parallelen Programmversion liegt das Hauptproblem nicht darin, das Lattice-Boltzmann-Verfahren selbst zu parallelisieren, sondern die Rekonstruktion der Oberflächen und ihrer Krümmungen. Dies allein stellt sich in der parallelen Programmversion als Problem dar, wenn man nicht bereit ist, einen erheblichen parallelen Overhead in Kauf zu nehmen, der die Rechenzeiten dann wieder verlängern würde. Zusätzlich tritt das Problem der Lastbalancierung auf, da die zeitvariable Geo-

net mass flux from SRT is similar to the classical Hetzr-Knudsen-Schrage expression for mass flux. The existing SRT model do not describe the experiments on evaporation well and this is due to the fact that the role of heat fluxes was also ignored while the model was postulated. The SRT was applied to a three layer model while considering the heat fluxes and properties of the free surface. It was indicated that the heat fluxes from either side of the surface are linearly related with the net mass flux for evaporation. On comparing the calculated equilibrium liquid and vapor evaporation fluxes K_l and K_v , one can conclude that the evaporation is mainly controlled by the transport mechanism of molecules from liquid side. From the expressions of heat and mass fluxes adopting extended three layer SRT model, the requirement of an additional boundary condition at the free surface is fulfilled. Thus, the set of conservation equations can be numerically solved by taking this model into account. However, the role of surface tension driven convection was not taken into account in deducing the expression for net mass flux from the free surface.

References

- [1] R. Marek and J. Straub. Analysis of the evaporation coefficient and the condensation coefficient of water. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44:39–53, 2001.
- [2] C.A. Ward and G. Fang. Expression for predicting liquid evaporation flux: Statistical rate theory approach. *Phys. Rev. E*, 59:429–440, 1999.
- [3] G. Fang and C.A. Ward. Temperature measured close to the interface

- of an evaporating liquid. *Physical Review E*, 59(1):417–428, 1999.
- [4] V. Kumar, K.D. Danov, and F. Durst. Theoretical treatments of liquid vapor interfaces with evaporation. *Int. J. Heat Mass Transfer*, In preparation, 2003.
- [5] K.D. Danov, C.A. Ward, and F. Durst. Heat and mass flux at the interface of an evaporating liquid: Statistical rate theory of three-phases. *Phys. Rev. E*, Submitted for publication.
- [6] H. Hertz. Über die Verdunstung der Flüssigkeiten, insbesondere des Quecksilbers, im luftleeren Raume. *Ann. Phys. Chem.*, 17:177–200, 1882.
- [7] M. Knudsen. Die Maximale Verdampfungsgeschwindigkeit des Quecksilbers. *Ann. Phys. Chem.*, 47:697–708, 1915.
- [8] R.W. Schrage. *A Theoretical Study of Interphase Mass Transfer*. Columbia University Press, 1953.
- [9] Y-P. Pao. Temperature and density jumps in the kinetic theory of gases and vapors. *Phys. Fluids*, 16:1560, 1973.
- [10] J.W. Cipolla Jr., H. Lang, and S.K. Loyalka. Kinetic theory of condensation and evaporation II. *J. Chem. Phys.*, 61:69–77, 1974.
- [11] J.W. Gibbs. *The Scientific Papers of J. Willard Gibbs*. Dover Publications Inc., 1961.
- [12] G. Bertrand, M. Lallemand, A. Mokhlisse, and N. Roudergues. New results on the dependence of the liquid evaporation rate on the pressure of its vapor. *Thermochimica Acta*, 38:67–78, 1980.

al. [12] obtained a temperature profile across the water-vapor interface which is very similar to the experimental results of Fang and Ward [2]. The heat fluxes normal to the surface are computed with the help of temperature profiles in the experiment [12]. As mentioned earlier, the equilibrium molecular exchange rate K_l is constant for a liquid in case of such experiments [3, 12]. Thus, according to Eq. (7), the normal heat flux from liquid side $\dot{q}_l$ is plotted against the neat mass flux $\dot{m}$ in Fig. 1. It is very interesting to find that the heat flux from the liquid side is linearly related to the net mass flux for the range of pressures and temperatures in both the set ups [3, 12]. However, a single data set could be extracted from Bertrand et al.[12] investigations on evaporation while they reported only one temperature measurement across the water-vapor interface during evaporation of water in a plexiglass tube. Fang and Ward [3] also used a plexiglass funnel in order to carry out their experiments. Thus, it can be assumed that in both the studies the heat transfer in directions tangential to the interface is not significant. From the slope and the intercept of the linear curve in Fig. 1, it is found out that within the experimental accuracy

$$\varepsilon_{ls} = \varepsilon_{sl} = \varepsilon_l. \quad (10)$$

For water, the interfacial energy transfer ε_l is found to be 2.27×10^6 J/kg. The value of K_v is not constant for all experiments, therefore it is appropriate to write Eq. (8) in the form

$$\frac{\dot{q}_v}{K_v} = -\frac{\dot{m}}{K_v} \left(\frac{\varepsilon_{sv} + \varepsilon_{vs}}{2} \right) + (\varepsilon_{sv} - \varepsilon_{vs}). \quad (11)$$

Fig. 2 shows a linear regression $\frac{\dot{q}_v}{K_v}$ vs. $\frac{\dot{m}}{K_v}$ plot; the correlation coefficient for

the fitted line is 0.9806 which indicates a good agreement of the data with Eq. (11). Following the similar procedure as it is done for the liquid, for the molecular transfer between vapor and water, the interfacial transfer energy $\varepsilon_v = \varepsilon_{sv} = \varepsilon_{vs}$ is found to be 3.53×10^5 J/kg. Thus, one can conclude that the interfacial energy transfers are independent of the pressures and temperatures and are constant for the range of these experiments conditions. Furthermore, the mass flux can linearly be correlated for the range of such type of experiments. It is important to know that the influence of thermocapillary convection is not taken into account in the analysis. For evaporation of water in a low conductivity material such as in the experiments of Fang and Ward [3] where a plexiglass funnel was used, the heat transfer in the directions tangential to the free-surface is not important.

4 Conclusions

The theoretical treatment of evaporation at liquid-vapor interfaces using kinetic theory of gases (KTG) do not produce a consistent value of evaporation coefficient, η_{ev} . This is due to the fact that the heat transfer to the surface from both liquid and vapor sides are not taken into account. In KTG treatment of interfaces, the equations for the net mass flux derived only by considering the thermodynamic states of liquid and vapor and they do not conserve energy across the Knudsen layer. The predicted temperature jump from KTG qualitatively is in agreement with the experiments (both having same sign), however the predicted temperature jumps are 10 to 30 times smaller than that observed in the experiments.

The final results from existing statistical rate theory expressions by Ward and Fang [2] were considerably simplified. It was found out that linear expression for

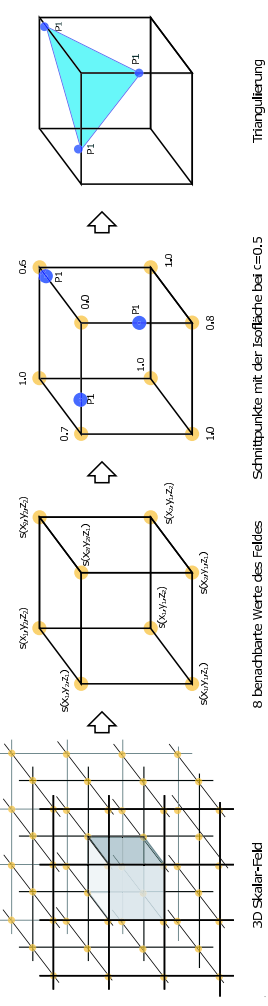


Abbildung 3: Der Marching-Cubes-Algorithmus.

metrie der Schäume keine rein statische Partitionierung des Rechengebietes erlaubt. Auch hier müssen die existierenden Ansätze noch auf ihre Eignung in der speziellen Situation untersucht und ggf. angepasst und erweitert werden. Damit werden die Strömungsphänomene in Metallschäumen simuliert werden können.

In jedem Fall ist bereits jetzt absehbar, dass das schon in Entwicklung befindli-

che Simulationsprogramm für das erweiterte physikalische Modell bei realistisch großen Simulationsgebieten auch auf der SR8000 nicht mehr mit akzeptablen Rechenzeiten laufen wird. Nach der aktuellen TOP-500-Liste ist somit in ganz Deutschland kein Rechner verfügbar, mit dem die Herstellung von Metallschäumen realistisch simulierbar wäre. Gegenüber der SR8000 ist in der nächsten Stufe eine

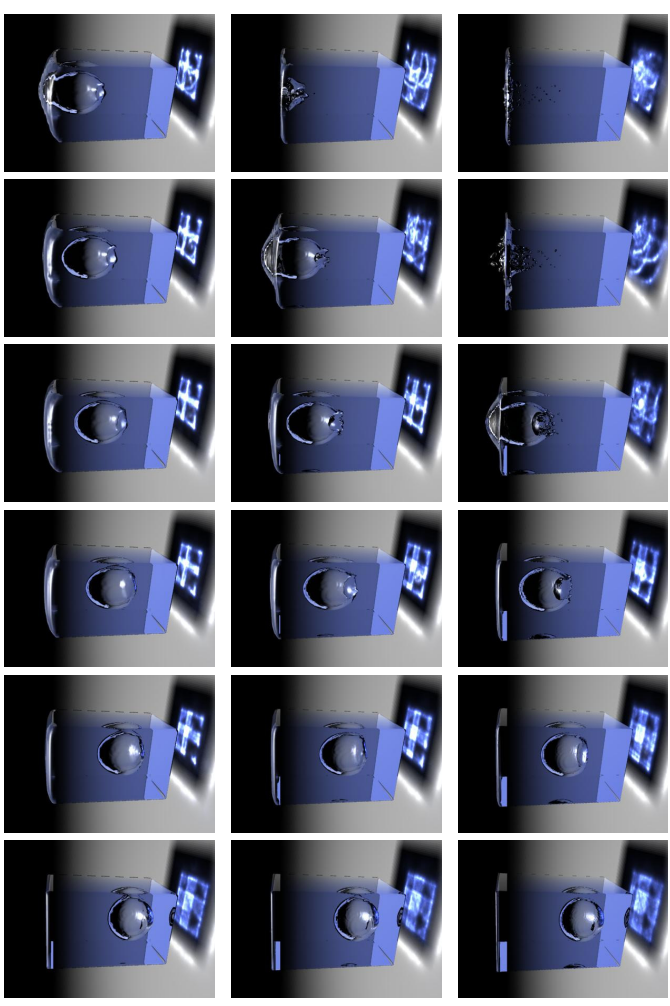


Abbildung 4: Drei aufsteigende Blasen unterschiedlicher Größe.

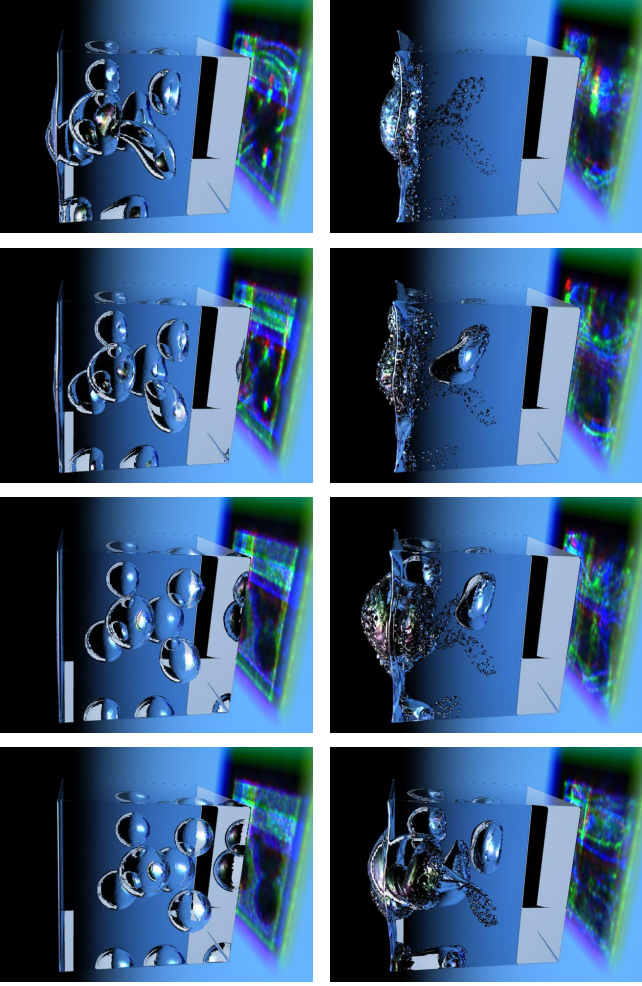


Abbildung 5: Sechs aufsteigende Blasen in einem Container.

Leistungssteigerung um den Faktor 10 – 100 nötig. Eine derartige Rechenleistung hat aktuell nur der japanische Earth-Simulator zu bieten. Der geplante Nachfolger für die Hitachi SR8000 wird hoffentlich in die Nähe dieser Rechenleistung vorstoßen, und es damit möglich machen, auch komplexe physikalische Probleme in den Metallschäumen zu simulieren.

Literatur

- [1] M. Arnold, M. Thies, C. Körner, and R.F. Singer. Experimental and numerical investigation of the formation of metal foam. *Materialsweek*, 2000.
- [2] Henrik W. Jensen. *Realistic Image Synthesis Using Photon Mapping*. A K Peters Ltd, 2001.
- [3] William Lorenson and Harvey Cline. Marching cubes: A high resolution 3D surface reconstruction algorithm. In *Computer Graphics Vol. 21, No. 4*, pages 163–169, August 1987.
- [4] Thomas Pohl. FreeWiHR, 2003. <http://www10.informatik.uni-erlangen.de/en/Research/Projects/FreeWiHR/>.
- [5] Nils Thürey. A single-phase free-surface Lattice Boltzmann Method. Diplomarbeit, Lehrstuhl für Informatik 10, Universität Erlangen-Nürnberg, 2003.
- [6] Nils Thürey. Fluid simulation with LBM, 2003. <http://www.ntoken.com/fluid>.
- [7] Dieter A. Wolf-Gladrow. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*. Springer, 2000.

The heat balance on the three layer system shown is also performed. Each interfacial molecular transfer associated with a certain amount of energy transfer between different phases. This introduces additional unknown interfacial transport properties: the liquid-surface energies ε_{ls} and ε_{sl} , and surface-vapor energies ε_{sv} and ε_{vs} between the surface and liquid phases. However, in this extended model for evaporation, these unknown interfacial properties can directly be estimated with the help of measurable quantities. Thus, the normal heat fluxes from the liquid ($\dot{q}_l$) and vapor ($\dot{q}_v$) sides to the surface are estimated to be [5]:

$$\dot{q}_l = \dot{m} \left(\frac{\varepsilon_{ls} + \varepsilon_{sl}}{2} \right) + K_l(\varepsilon_{ls} - \varepsilon_{sl}) \quad (7)$$

and

$$\begin{aligned} \dot{q}_v = & -\dot{m} \left(\frac{\varepsilon_{sv} + \varepsilon_{vs}}{2} \right) \\ & + K_v(\varepsilon_{sv} - \varepsilon_{vs}) \end{aligned} \quad (8)$$

where K_v is the equilibrium molecular exchange flux between surface and vapor phases and is given by [2, 5] in terms of thermodynamics states of vapor i.e. temperature of the reservoir, T_R and the final equilibrium pressure in vapor corresponds to a state when specific free energies of liquid and vapor are same:

$$K_v = \sqrt{\frac{M}{2\pi RT_R}} P_v^e \quad (9)$$

The second terms (containing K_l and K_v) on the right hand side of both Eqs. (7) and (8) can be interpreted as a heat fluxes through the surface in the absence of net mass flux $\dot{m}$. The relationships for the heat and mass fluxes [Eqs. (5)–(8)] with the help of SRT close the problem of boundary condition at a liquid-vapor interface.

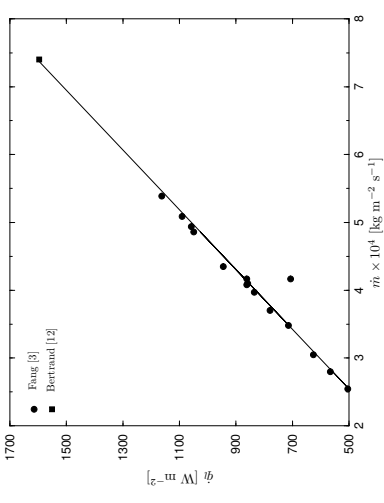


Figure 1: Linear regression plot of $\dot{q}_l$ vs. $\dot{m}$ for evaporation of water in accordance with Eq. (7).

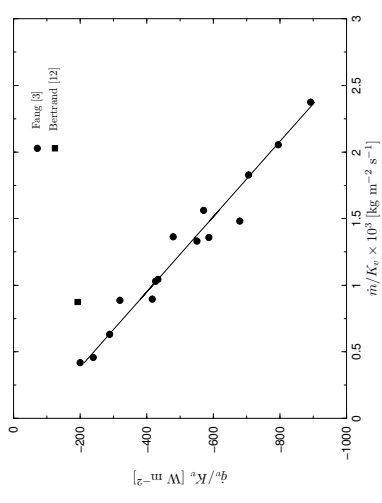


Figure 2: Linear regression plot of $\dot{q}_v$ vs. $\dot{m}$ for evaporation of water in accordance with Eq. (11).

3 Experimental Results and Comparison

From the above analysis, it can be noticed that the extended SRT approach provides a linear relationship between heat fluxes across the interface and net evaporation mass flux. Except in few experiments [3, 12], the most of the data available from the evaporation experiments in literature do not consist of heat fluxes. The data of evaporation experiments of water by Fang and Ward [3] are provided in Table 1. Bertrand et

tal equilibrium of the system. In SRT, no assumption of equilibrium thermodynamics is taken into account and the theory leads to rate equations that are entirely in terms of experimental and thermodynamics variables that may be measured or controlled. SRT has been applied to various physical rate phenomena for instance, gas adsorption, thermal desorption, crystal growth from solutions, membrane transport.

Adopting SRT, Ward and Fang [2] derived an expression for evaporation flux

$$\dot{m} = 2K_e \sinh\left(\frac{M}{R}\Delta s_{lv}\right) \quad (3)$$

in terms of thermodynamic variables where K_e is the equilibrium molecular exchange rate between liquid and vapor and Δs_{lv} the entropy change associated with the transference of molecules between liquid and vapor contiguous phases. The thermodynamic functions K_e and Δs_{lv} depend explicitly on the physiochemical properties of the system [2, 5]. Kumar et al. showed [4] that in case of slow evaporation, the linear form of Eq. (3) results into an expression for net mass flux

$$\dot{m} \approx 2\sqrt{\frac{M}{2\pi RT_l}}[P_{\text{sat}}(T_l) - P_v] \quad (4)$$

which is similar to the KTG expression (1) with $\eta_{\text{ev}} = \eta_{\text{con}} = 1$. The major reason for the *inability* of both KTG and SRT is that the role of heat fluxes across the interface is ignored. Furthermore, the thermophysical properties of liquid surface can not be ignored while treating the dynamics of heat and mass. It is well known from the classical theory of Knudsen that between the liquid and vapor, a kinetic boundary layer “Knudsen Layer” exist whose thickness is of the order of the mean molecular free path. However

the surface of liquid has its own thermophysical properties which are different from both bulk liquid and vapor phases; there exist a very thin layer which can be termed as “transition zone”. According to Gibbs [11], the surface tension σ represents the integral across this layer of the difference between the normal and tangential components of the pressure tensor. The role of the transition zone can not be neglected in the postulation of model for evaporation when SRT is applied. Therefore, the general SRT expressions for evaporation mass flux need to be generalized by taking the roles of heat fluxes and the transition zone into account.

Recently Danov et al. [5] proposed an *extended three layer* model by taking out the earlier assumption of Ward and co-workers [2, 3] that in an isolated three-phase system, the temperatures of liquid, surface and the reservoir are same. They [5] extended the SRT approach in order to estimate the net mass flux $\dot{m}$ in terms of measurable and thermodynamic variables and derived an expression for $\dot{m}$

$$\dot{m} = K_l \sinh\Phi_{lv} \quad (5)$$

where

$$\Phi_{lv} = \left[\frac{M}{R} \left(\frac{h_v - h_l}{T_l} \right) \left(\frac{T_v - T_l}{T_v + T_l} \right) \right] \quad (6)$$

and K_l is the equilibrium molecular exchange fluxes between liquid and surface. Using data of Fang and Ward [3] for water and other hydrocarbons, Danov et al. [5] found a linear relation between the net mass flux $\dot{m}$ and $\sinh\Phi_{lv}$. From the slope of the line for the case of evaporation of water K_l was found to be about $6.7 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^2 \text{ s}$. In order to derive Eq. (5), it was assumed that the reservoir temperature is the mean of liquid and vapor temperature across the surface.

Neues vom Projekt BESTWIHR

The necessity of large-scale simulations in studying wall-bounded turbulence

K. N. Beronov, P. Lammers, F. Durst

Lehrstuhl f. Strömungsmechanik, Erlangen

Numerical simulation of wall-bounded flows is a well established research area, but its main tasks remain to be achieved. Computations with turbulence modeling in the near-wall region still suffer from serious deficiencies: they rely on oversimplified models that do not deliver adequate turbulence statistics at the very source of turbulence, and they still encounter difficulties in transient regions. Thus, direct simulations remain an indispensable tool for research and modeling.

With contemporary capacities, they already deliver better statistical description of the turbulence immediately at the wall, as compared with experimental methods. But they still need to expand in scale in order to meet the need for information quality required for adequate modeling. A satisfactory understanding of the near-wall mechanisms of turbulence regeneration is only recently beginning to take shape, as a result of very large simulations and the use of purely numerical tools of fluid dynamics research. Reynolds number effects in this most important region still leave unanswered questions. The high-Reynolds number limit description of layers far from the wall has remained out of the each of direct numerical simulations.

Very large-scale simulations of developed incompressible turbulence in a plane channel flow at a moderate Reynolds numbers, was performed by an LSTM group. A lattice Boltzmann code [1] developed at LSTM allowed efficient use of the Hitachi SR8000 supercomputer at

the LRZ in Munich. A validation and preliminary results from this simulation were announced in a recent Qurtl issue. This large-scale computation is, in a sense, the first sufficiently resolved simulation at Reynolds number $Re_\tau = 180$. Such Re_τ has been first simulated by pseudospectral DNS some quarter of a century ago [2]. As detailed below, the added computing power and software development which made the new simulation possible, were necessary to clarify a whole row of disputable issues and to collect turbulence statistics which were either not available or of unsatisfactory quality in earlier works. The success of the scaled-up computation and in particular of the underlying efficient numerical scheme based on the lattice Boltzmann method, point out a promising direction for the advancement in the scope of well resolved simulations of wall-bounded turbulence. To emphasize the importance of “well resolved” computations, this article lists several turbulence features, which have remained unrecognized over the quarter of a century since the first DNS [2].

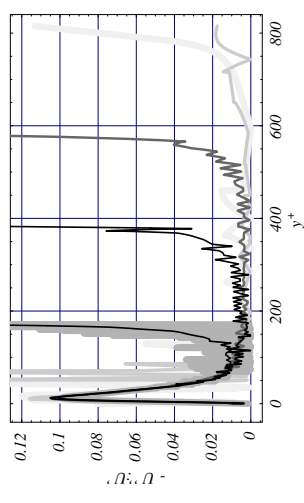


Figure 1: A measure $(-U''/U')$ of turbulent production by mean flow $U(y^+)$, as function of distance from the wall y^+ in wall units. Experimental ($Re_\tau = 830$) pipe data fluctuate near the wall, DNS ($180 \leq Re_\tau \leq 590$) channel data [1,3] fluctuate in the flow core.

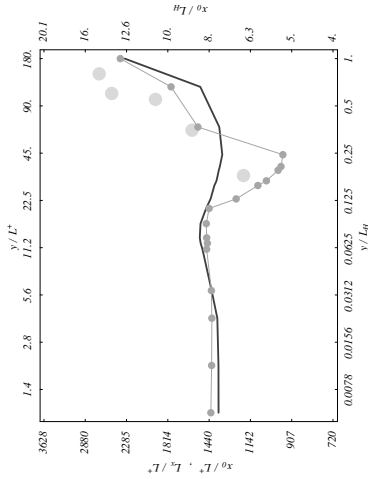


Figure 2: Turbulent length scale in streamwise direction (defined from autocorrelation, either by its first zero crossing or its integral) as function of distance from the wall. Experimental pipe flow data (points) compared to channel flow LB numerical data (lines).

To begin with, it must be noted that sufficient streamwise length is crucial for obtaining correct statistics from measurements or simulations of turbulent shear flows. The effect of main shear to continuously increase streamwise turbulent length scales is well known and is understood [4] in the framework of the rapid distortion theory (RDT), a linearized formalism applicable in conditions of sustained strong shearing, such as that found near the walls in turbulent channel flows [4]. Insufficient domain length was found to compromise even simple statistics, such as (derivatives of) the mean flow profile $U(y)$ obtained from DNS (Figure 1), not to speak of higher-order statistics. The (Eulerian) turbulent correlation length must fit comfortably into the computational domain in order to assure statistical convergence. In the flow core, far from the walls, the mean-flow shear, as well as turbulence intensity, are weaker, so their time scales are longer, while turbulent structures travel faster. This increases the turbulent length scale (clearly seen

from Figure 2) and means that higher Re_τ require much longer computational domains and thus larger-scale simulations. Experimental measurements can be no adequate substitute for DNS, at least near the wall. Figure 1 suggests that DNS and laboratory data should be used in a mutually complementary way.

Integral length scales of turbulence can be defined in different ways, but the qualitative trends remain unaffected by the particular choice of definition. As seen in Figure 1, using two different definitions suggest the same picture: near the wall, over the viscous and buffer layers, the characteristic streamwise length scale is about 1500 wall units, but further away from the wall, it grows rapidly with increasing distance y . The figure shows good quantitative agreement between lattice Boltzmann DNS of plane channel flow and laser-Doppler measurements in pipe flows at much higher Re_τ . For a reliable determination of these scales, an extremely long computational domain is required. Figure 3(a) shows half of the domain size used (the horizontal axis is distance in wall units, the vertical axis is two-point autocorrelation of the streamwise turbulent velocity fluctuations). Such domain size is indeed needed to obtain acceptable predictions of long-range correlations — as shown in Figure 3(b), shorter domain lengths lead to self-excitation along the spatially periodic streamwise coordinate, and hence to the unphysical prediction of nonvanishing autocorrelations at infinite length. As implied by the discussion further above and illustrated by the figure, this effect is especially pronounced far from the wall and at higher Re_τ , where $U(y)$ is larger. The critical difference, with respect to the scale of the numerical problem, between the lattice Boltzmann (LB) simu-

$\dot{m} \times 10^4$ (kg m ⁻² s ⁻¹)	T_l (°C)	T_v (°C)	P_v (Pa)	$T_v - T_l$ (°C)	$T_v - T_l$ KTG-(°C)	$\dot{q}_v$ (W m ⁻²)	$\dot{q}_l$ (W m ⁻²)
2.799	-0.3	3.2	596.0	3.5	0.114	-133.8	565.9
2.544	-2.9	0.6	493.3	3.5	0.138	-132.9	503.1
3.049	-4.8	-0.6	426.6	4.2	0.165	-139.5	622.7
4.166	-5.2	-1.0	413.3	4.2	0.177	-150.0	891.5
3.703	-8.9	-3.8	310.6	5.1	0.246	-153.9	771.8
3.480	-7.7	-2.7	342.6	5.0	0.239	-162.1	707.9
3.971	-7.8	-1.6	333.3	6.2	0.247	-164.6	828.1
4.081	-10.7	-4.6	269.3	6.1	0.312	-168.9	851.3
4.347	-10.3	-4.3	277.3	6.0	0.267	-152.7	934.1
4.097	-11.0	-4.9	264.0	6.1	0.335	-176.9	847.3
4.860	-10.6	-4.1	269.3	6.5	0.322	-177.6	1037.0
4.166	-11.9	-6.0	245.3	5.9	0.392	-191.1	850.4
4.938	-12.4	-5.2	233.3	7.2	0.404	-190.8	1044.0
5.086	-13.5	-6.2	213.3	7.3	0.456	-196.9	1075.0
5.386	-14.6	-6.8	194.7	7.8	0.511	-202.3	1144.0

Table 1: Summary of experiments of water evaporation by Fang and Ward [3].

where T_l the liquid surface temperature, $P_{\text{sat}}(T_l)$ the saturation liquid pressure at temperature T_l , P_v the vapor pressure of the liquid, T_v the temperature in vapor across the interface, M the molecular weight of the liquid and R the universal gas constant. Eq. (1) is known as the famous Hertz-Knudsen-Schrage equation for net evaporation mass flux. The evaporation coefficient η_{ev} was introduced (usually assumed to be unity) in order to distinguish between experimental and theoretical values of the evaporation rate. However, Marek and Straub [1] pointed out that the value of evaporation coefficient varies four orders of magnitude for the experiments performed in past.

Adopting kinetic theory of gases, Pao [9] and Cipolla et al. [10] derived the macroscopic jump conditions in case of low evaporation rates. According to them

$$\frac{T_v - T_l}{T_l} = -0.3159 \sqrt{\frac{M}{RT_l}} \frac{T_v \dot{m}}{P_v} - 0.7369 \sqrt{\frac{M}{RT_l}} \frac{T_v \dot{q}_v}{P_v T_l}. \quad (2)$$

They took Chapman-Enskog thermal conductivity solution into account for vapor phase out of the Knudsen layer. The calculated temperature discontinuity at the surface from Eq. (2) for the experiments of Fang and Ward [3] are presented in Table . Theoretically estimated temperature jumps from KTG are 10–30 times smaller than the experimentally observed values. Thus one can conclude that the KTG does not account for the temperature jumps and the net mass flux across liquid-vapor interfaces. Therefore, A consistent theory is indispensable for a precise estimation of evaporation rate of water.

2.2 Statistical Rate Theory

The statistical rate theory (SRT) is based on the transition probability concept in quantum mechanics and makes use of Boltzmann definition of entropy to introduce a thermodynamic description of the system. SRT predicts an irreversible evolution to a configuration that corresponds to the maximum number of quantum mechanics states, which can be far from to-

Extended Statistical Rate Theory for Liquid Evaporation

Von V. Kumar, K.D. Danov* und F. Dürst
Lehrstuhl f. Strömungsmechanik, Erlangen

1 Introduction

Evaporation of water at free surfaces has been the subject of investigations of several researchers in the past decades owing to its wide technical applications. Both experimental and theoretical investigations have been carried out in past in order to understand the evaporation of a pure liquid. The theoretical treatment of the rate of liquid evaporation at free surfaces adopting kinetic theory of gases (KTG) brings in a so-called evaporation coefficient η_{ev} on the basis of rational arguments. However, experimental investigations performed over the last few decades reveal drastic disagreements between theory and experiments. This was pointed out in quite a few investigations in the literature. Marek and Straub [1] presented a detailed review of the experimentally obtained evaporation coefficient. They figured out that the values of evaporation coefficient deduced from measurements are scattered over the decades. Various arguments were provided in the literature for the significant differences between experimentally obtained and theoretically predicted evaporation coefficient, such as rapid cooling of the interface, impurities at the surfaces and inaccurate measurements of the temperature across the interface.

Ward and co-workers [2, 3] carried out a series of experiments on steady-state evaporation of water. Their experiments were carefully performed utilizing pure distilled water in order to avoid any im-

purity in their set up. It is amazing to note that they observed a maximum discontinuity of temperature of 7.8°C across the liquid-vapor interface. So far, no one else has reported such a large temperature discontinuity across the free surface of water. Ward and Fang [2] proposed that the statistical rate theory (SRT) can account for the evaporation rate. However, with the help of SRT treatment of interface by Ward and co-workers [2], the temperature discontinuity at liquid vapor interfaces could not be accounted for.

In recent publications, emerging out of a research work at LSTM-Erlangen [4, 5], it is shown that existing theories of evaporation of liquids on free surfaces are incomplete. The extension of the statistical rate theory proposed by Ward and co-workers [2, 3] permitted discrepancies on evaporation coefficients in literature to be eliminated. It is therefore felt that the theoretical work at the institute provides a sound basis for new treatments of momentum, heat and mass transfer occurring during evaporation of liquids. The experimental observations and the extended SRT exhibit a good agreement with each other.

2 Theoretical Interface Treatment

2.1 Kinetic Theory of Gases

Ever since pioneer works of Hertz [6] and Knudsen [7], kinetic theory of gases has widely been employed to understand liquid evaporation. Later, Schrage [8] modified the expression for net mass flux due to evaporation by taking non-equilibrium back scattering of molecules into account. He proposed the net mass flux through a liquid-vapor interface

$$\dot{m} = \frac{2\eta_{\text{ev}}}{2 - \eta_{\text{ev}}} \sqrt{\frac{M}{2\pi R}} \left[\frac{P_{\text{sat}}(T_l)}{\sqrt{T_l}} - \frac{P_v}{\sqrt{T_v}} \right] \quad (1)$$

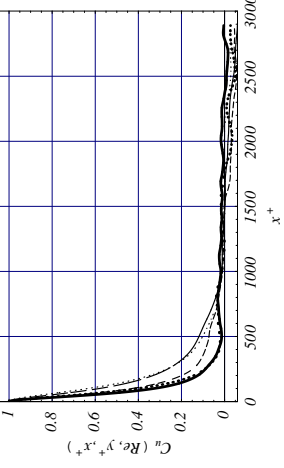
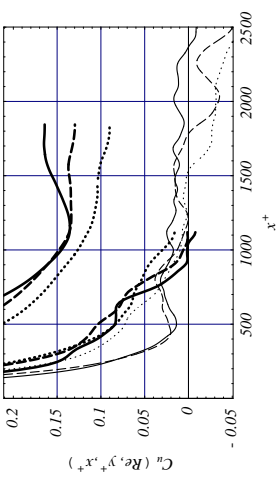


Figure 3: Streamwise velocity autocorrelation with streamwise separation (in wall units) (a) from lattice Boltzmann DNS [1] at distances $2 \leq y^+ \leq Re_\tau$ from the wall, shown over the full range of separations $0 \leq x^+ \leq L_x/2$, with L_x the streamwise length of the periodic computational domain,



(b) at large distances y^+ from the wall, from DNS with a LB (with zero-crossing, $Re_\tau = 180$) method [1] and a pseudo-spectral (no zero-crossing, $Re_\tau = 180, 590$) method [3].

lations presented [1] and pseudospectral DNS similar to those mentioned [2,3] is not the streamwise length of the computational domain in physical units, where the scale-up is “only” by a factor of 1.5–4, but in the uniform spatial resolution, which is naturally linked to LB methods but is intentionally neglected in pseudospectral DNS, where grid step aspect ratios are taken $O(10)$ on the average. Such large ratios are tacitly justified by the well known fact that typical turbulent structures are strongly elongated in the streamwise direction. Such structures dominate the flow at all distances from the wall and become especially long away from the walls [5]. In-

deed, the presentation so far has been focused on the consequences of their dominance and the necessity for long enough domains. However, important aspects of the turbulent dynamics, such as dissipation and mixing, are controlled not (only) by the length of intense structures (vortices and velocity streaks) but by their detailed spatial characteristics, such as spacing, diameter, and aspect ratios. Smaller structures are especially intensive in the near-wall region and thus important for the overall turbulent balances. Figure 4 shows snapshots of vorticity components, representative for the spatial structure of vorticity in the near-wall region. It is important to note that

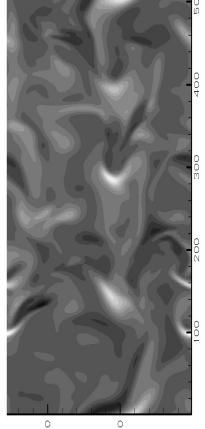
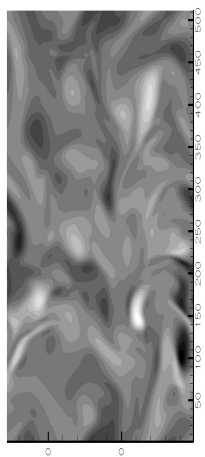


Figure 4: Instantaneous structure of turbulent vorticity (a) spanwise vorticity — the component aligned with the mean-flow vorticity,



(b) streamwise vorticity — the component enhanced most by mean-flow shear.

the dominant features have diameters as small as a few wall units, independent of their orientation, with a major contribution coming from structures which are far from being aligned with the streamwise direction. The implication is that discretizations using unproportionally large spatial steps in the streamwise direction do not resolve the vorticity field. But vorticity plays the leading role in any turbulence generation process, including the near-wall regeneration of interest here.

The turbulent statistics of greatest engineering interest are not correlations but one-point statistics such as the mean flow and the Reynolds stress tensor. These are lower-order moments of the hierarchy of statistical moments of the one-point probability distribution functions (PDFs) of single turbulent velocity components. Higher-order moments of these PDFs are more sensitive to intermittency, which is in turn enhanced by the presence (and dominance) of intense, small-scale flow structures such as the vorticity features considered above. Poor resolution of such features leads to erroneous prediction of the large-deviation tails of PDFs. A coarse grid will “smear out” fine spatial details and will tend to increase their contribution to the statistics. This can be observed in the form of higher tails of computed PDFs as compared with the physically correct distributions. Since LB simulations have necessarily isotropic spatial resolution, a grid fine enough to resolve the structure of turbulence in the vertical will equally well resolve that structure in the streamwise direction, as well. Thus, DNS by LB methods produce more reliable estimates of velocity PDFs than simulations using stretched grids, and can be expected to yield lower tails for those PDFs which are dominated by vorticity structures and

hence have intermittent, slowly decaying tails. Among the three turbulent velocity components, most intermittent is the wall-normal velocity v , while the streamwise u is least intermittent. So it is most informative to consider PDFs of v , when comparing LB and stretched-grid DNS. Figure 5 shows precisely the expected trend. It also demonstrates, through the much longer and better converged tails obtained from the LB simulation, the importance of fine-grid, large-scale DNS. The difference in data quality seen in this figure is the result from an increase in the number of grid points by a factor between 16 and 64. To accumulate the same number of data points as those used for the LB data plot in Figure 5, and thus hope for similar quality of PDF tails, an experimentalist would need to take 10^6 to 10^8 times more measurement points than what is a standard record length these days. This is technically very demanding, particularly very near to the wall, to which region the PDFs shown here pertain. Precise knowledge of the highly intermittent statistics of v is of key importance in modeling near-wall mixing and turbulence generation.

In conclusion, very large-scale DNS of wall-bounded turbulence are required to obtain reliable information about the structure of turbulence, both instantaneous and statistical. The generally accepted type of (typically pseudospectral and thus formally very precise) DNS with stretched grids near the wall was found to yield imprecise information on the fine structure of turbulence. The numerical grid must be fine in all directions, at least near the wall, where intense structures of small cross-section are important. This is the flow region where DNS have already become the tool of choice for detailed flow measurements. Experimental

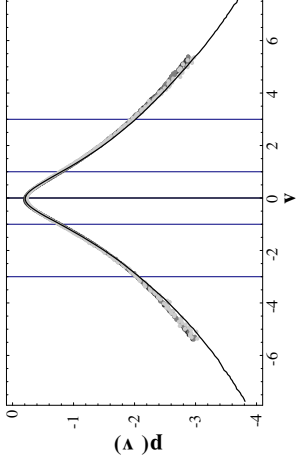
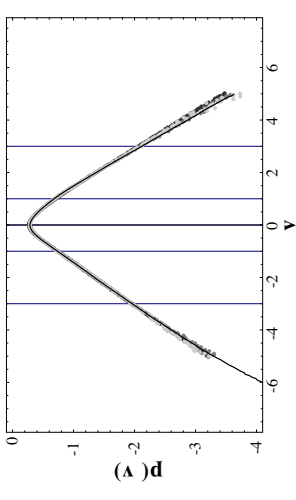


Figure 5: Probability distribution functions $p(v, y)$ of the wall-normal velocity component v , from DNS by LB [1] (lines) and pseudospectral [3] (circles) methods.

(a) distance $y^+ \approx 5$ from the wall (horizontal axis normalized by the r.m.s. value of v);



(b) distance $y^+ \approx 20$ from the wall, outer edge of turbulence generation layer.

References

- [1] P. Lammers, K.N. Beronov, G. Brenner, F. Durst (2003) Direct simulation with the lattice Boltzmann code BEST of developed turbulence in channel flows, in *High Performance Computing in Science and Engineering*, S.Wagner, W.Hanke, A.Bode, F.Durst (ed.s), Springer.
- [2] J. Kim, P. Moin, R. Moser(1987) Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number, *J. Fluid Mech.* **177** 133–166.
- [3] R. Moser, J. Kim, N.N. Mansour (1999) Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$, *Phys. Fluids* **11** 943–945; <http://www.tam.uic.edu/faculty/moser/channel/>.
- [4] A.A. Townsend (1976) *The structure of turbulent shear flow*, Cambridge Univ. Press.
- [5] Z. Liu, R.J. Adrian, T.J. Hanratty (2001) Large-scale modes of turbulent channel flow: transport and structure, *J. Fluid Mech.* **448** 53–80.