Best Practice Guide:
Vermeiden typischer Fehlerquellen

S. Roller[1], M. Ferch[2], C.-D. Munz[2], M. Dumbser[2]

Universität Stuttgart
[1]Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)
www.hlrs.de
[2]Institut für Aerodynamik und Gasdynamik (IAG)
www.iag.uni-stuttgart.de

Inhalt

- Unsicherheiten und Fehler
- Validierung / Verifikation
- Bemerkungen

Benchmark-Test

Zwei Arten Benchmarks:

- bekannte Beispiele
- unbekannte Beispiele

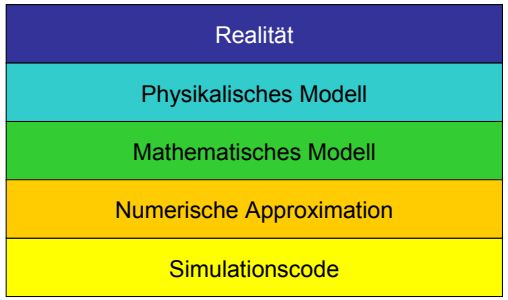
Typische Effekte
- Tuning
- beliebig viele Lösungen

Was nützen Benchmark-Test dann?

1. Verifikation der eigenen Implementierung
2. Vergleich ganzer Klassen von Verfahren
   -> Empfehlungen für neue Codes oder Bug-Fixes
3. Erzeugen verlässlicher Vergleichslösungen für neue Forschungsgebiete

   http://www-ian.math.uni-magdeburg.de/anume/testcase/index_e.html

Unsicherheiten und Fehlerquellen in der Simulation



Modellfehler und Modellunsicherheiten

Optimale Vorgehensweise: Allgemeine Ansätze entwickeln, an bekannten Fällen testen, dann auf neue Fälle anwenden

Ingenieur-Vorgehensweise: Ansatz für bekannten Fall entwickeln, auf neue Fälle anwenden

Beispiel: Turbulenzmodell

Optimal: Direkte Numerische Simulation
-> Viel zu teuer, für praktische Probleme nicht durchführbar

Modelle für Spezialfälle: z.B. k-ε-Modell
-> streng genommen nur für isentrope Turbulenz

Numerische Fehler

1. Problem: endliche Zahlendarstellung im Rechner
2. Diskretisierungsfehler: Gitter geeignet wählen
3. Instationär: Zeitschrittweite geeignet wählen
4. Iterative Lösungen: „bis sich nichts mehr ändert“ Abbruchkriterien geeignet wählen (Residuum)
5. Inkonsistenz: Selbst für kleinste Schrittweiten wird nicht die exakte DGL gelöst
6. Instabilitäten: Kleine Fehler können beliebig anwachsen

Numerische Fehler

Numerische Fehler sind unvermeidbar, ihre Auswirkungen oft schwer abzuschätzen

„Denn sie wissen nicht, was sie tun“

Ein Ingenieur muß in der Lage sein, Fehler und Genauigkeit seiner Simulation und die Fehlerquellen anzugeben.

-> Validierung und Verifikation

Methoden zur Fehlerkontrolle

Validierung: Sicherstellen, daß die richtigen Gleichungen gelöst werden

Verifikation: Sicherstellen, daß die Gleichungen richtig gelöst werden

Kalibrierung: Einstellung der Parameter
Notbehelf, wenn keine andere Möglichkeit
Koeffizienten des Modells oder des numerischen Verfahrens
z.B. Zustandsgleichung für Realgase oder Abbruchkriterien für Iterationen (welche Größe gibt den Ausschlag?)

Methoden zur Verifikation und Validierung

Verifikation:

- Gitterverfeinerungsstudien:
  Das Gitter wird so lange verfeinert, bis die Lösung nicht mehr von der Gitterweite abhängt
- Konvergenzstudien:
  die Abbruch-Schranke der Iteration wird variiert
- Vergleich mit analytischen Lösungen
- Vergleich mit der Lösung anderer numerischer Verfahren (Benchmark-Lösungen)

Validierung:

- Vergleich mit Experimenten

Training

Ein numerisches Verfahren ist keine Black-Box

Fähigkeiten, Fertigkeiten und Erfahrungswissen notwendig:

- auf welches Problem darf ich den Code anwenden?
- sind die Ergebnisse plausibel?
- sind sie fehler-kontrolliert, d.h. zuverlässig?
- sind sie nützlich (CFD = colourful fluid dynamics)?

In der praktischen Arbeit ist immer ein Abwägen zwischen dem gewünschten und dem möglichen Ergebnis notwendig.

Literatur

- AIAA G-077-1998: Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations
- ERCOFTAC (European Research Community On Flow, Turbulence And Combustion), Special Interest Group on Quality and Trust in Industrial CFD: Best Practice Guidelines