Adaptive Gittersteuerung für Lattice-Boltzmann Methoden

W. Dörfler⋆, I. Ginzburg†, M. Junk⋆, P. Klein†, W. Schäfer‡, K. Steiner†, M. Rheinländer†, J.-P. Weiß⋆.

Das Modell

Modellierung und Numerik in der Fluiddynamik

- Kontinuumsmechanischer Ansatz: Navier-Stokes-Gleichungen.
Direkte Berechnung der gesuchten Meßgrößen wie z.B. des Geschwindigkeitsfeldes $\boldsymbol{u}$ und des Druckes p. Die Diskretisierung erfolgt mittels Finite-Elemente- oder Finite-Differenzen-Verfahren.

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_t \boldsymbol{u} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u} + \nu\Delta\boldsymbol{u} &= -\nabla p\\ \nabla\cdot\boldsymbol{u} &= 0\end{aligned}}$$

- Teilchen-Kinetischer Ansatz: Boltzmann-Gleichung.
Beschreibung der Strömung durch die Verteilungsfunktion im Orts-Geschwindigkeitsraum, $f = f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t)$. Rückgewinnung der makroskopischen Größen $\boldsymbol{u}$ und ρ durch Momentenbildung. Diskretisierung mittels der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM).

$$\boxed{\partial_t f + \boldsymbol{v}\cdot\nabla f = Q(f,f)}$$

$$\boxed{\boldsymbol{u} = \rho^{-1}\int f\,\boldsymbol{v}\;dv}$$

$$\boxed{\rho = \int f\;dv}$$

Ferner lassen sich Strömungen auch direkt durch eine grob vereinfachte Teilchendynamik simulieren; es entfällt das Lösen von Gleichungen. Diese Lattice-Gas-Automaten haben historisch den Anstoß zur Entwicklung des leistungsfähigeren Lattice-Boltzmann-Verfahrens gegeben.

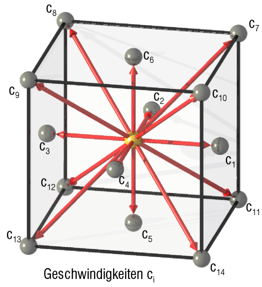
Das Lattice-Boltzmann-Verfahren

- Linearisierung des Stoßoperators $Q(f,f)$, z.B. durch BGK-Näherung. Die lokale Gleichgewichtsverteilung (Maxwellverteilung) ist f^{leq} und τ die Stoßzeit.

$$\boxed{Q(f,f) \overset{\text{BGK}}{\rightarrow} J(f) = -\tfrac{1}{\tau}(f - f^{leq})}$$

$$\boxed{f^{leq} = (\tfrac{m}{2\pi kT})^{\frac{3}{2}}\, e^{-\frac{m}{2kT}(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u})^2}}$$

- Ersetzung des Geschwindigkeitsraumes durch wenige diskrete Geschwindigkeiten $\boldsymbol{c}_0, \ldots, \boldsymbol{c}_N$. Jeder Geschwindigkeit wird eine eigene Verteilungsfunktion $F_0(\boldsymbol{x}, t), \ldots, F_N(\boldsymbol{x}, t)$ zugeordnet. Diese ersetzen zusammen die kontinuierliche Verteilungsfunktion f.



Diskretes Geschwindigkeitsgitter D3Q15

- Bei der Wahl des Geschwindigkeitsgitters müssen einerseits genügend viele diskrete Geschwindigkeiten zur Verfügung stehen, um realistische Ergebnisse zu erzielen, andererseits soll die Anzahl der $\boldsymbol{c}_i$ klein sein, um den Rechenaufwand gering zu halten.
- Aufstellen der diskreten kinetischen Gleichungen (Lattice-Boltzmann-Gleichungen), welche die Zeitentwicklung der Verteilungen $F_i(t, \boldsymbol{x})$ in diskreten Zeitschritten Δt auf einem Raumgitter beschreiben.

$$\boxed{F_i(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}_i\Delta t, t + \Delta t) - F_i(\boldsymbol{x}, t) = -\tfrac{\Delta t}{\tau}(F_i(\boldsymbol{x}, t) - F_i^{leq}(\boldsymbol{x}, t))}$$

- Die diskreten lokalen Gleichgewichtsverteilungen F_i^{leq} ergeben sich aus dem Prinzip der maximalen Entropie.
Um die Tauglichkeit des Modells zu überprüfen, versucht man daraus durch eine Multi-Skalen-Analyse die Navier-Stokes-Gleichungen in ähnlicher Weise herzuleiten, wie man vermöge der Chapman-Enskog-Entwicklung die makroskopischen Gleichungen (Euler/Navier-Stokes) aus der Boltzmann-Gleichung extrahiert.

Der LBM - Algorithmus für die BGK Näherung

Initialisierung der F_i durch Anfangsdaten auf dem Gitter: $\rho_0(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{u}_0(\boldsymbol{x})$.
Berechne $F_i^{leq}(\boldsymbol{x}, 0) = F_i^{leq}(\rho_0, \boldsymbol{u}_0)$ und setze $F_i(\boldsymbol{x}, 0) = F_i^{leq}(\boldsymbol{x}, 0)$.
Für $n = 1, 2, \ldots$ mit $t_n := n\Delta t$ führe aus:

i) Kollision (lokale Operation):
$\tilde{F}_i(\boldsymbol{x}, t_n) = F_i(\boldsymbol{x}, t_n) - \frac{\Delta t}{\tau}\Big(F_i(\boldsymbol{x}, t_n) - F_i^{leq}(\boldsymbol{x}, t_n)\Big)$,

ii) Propagation (Update):
$F_i(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{c}_i, t_n + \Delta t) = \tilde{F}(\boldsymbol{x}, t_n)$,

iii) neues lokales Gleichgewicht:
$F_i(\boldsymbol{x}, t_{n+1}) \rightarrow (\rho(\boldsymbol{x}, t_{n+1}), \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t_{n+1})) \rightarrow F_i^{leq}(\boldsymbol{x}, t_{n+1})$.

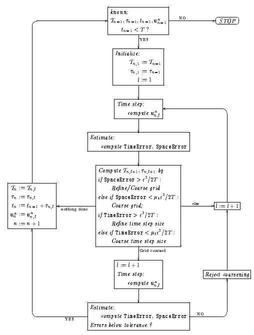
Die Werkzeuge

Adaptive Algorithmen

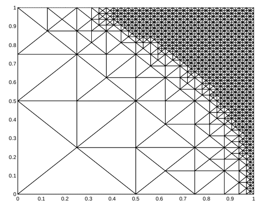
Der Einsatz adaptiver Techniken bei Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Methoden für elliptische, parabolische oder hyperbolische Probleme zeigt deutliche Vorteile im Hinblick auf Rechenzeit und Speicheraufwand. Die Vorgehensweise hierbei ist:

- Berechnung einer Lösung der diskreten Gleichungen auf einem gegebenen Raum-Zeit-Gitter.
- A posteriori-Abschätzungen liefern lokale Fehlerindikatoren und globale Fehlerschätzer zur Beurteilung der Güte der diskreten Approximation.
- Auswahl einer Markierungsstrategie: der lokale Fehlerindikator liefert Informationen, in welchen Bereichen das Raumgitter verfeinert werden muß oder ob es gar vergröbert werden kann.
- Gitterverfeinerung und -vergröberung unter Einhaltung bestimmter geometrischer Vorgaben an das Gitter (Lokalität, Stabiltät, Symmetrien, Nicht-Entartung der Elemente,...).
- Anpassung der Zeitschrittweiten an die lokale Raum-Gitterweite.
- Wiederholung der Prozedur, bis ein Genauigkeitskriterium erfüllt wird.

Ziel: Berechnung der Lösung unter optimaler Ausnutzung der Anzahl der Freiheitsgrade.



Flußdiagramm eines adaptiven Algorithmus



Adaptiv verfeinertes Dreiecksgitter

Anwendung auf Lattice-Boltzmann-Methoden

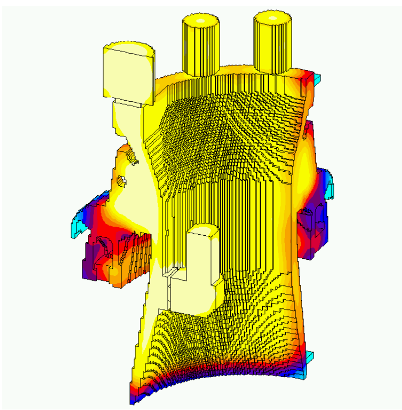
Probleme:

- Fehlerabschätzungen und geeignete lokale Fehlerindikatoren sind noch nicht bekannt.
- Die Implementierung des Lattice-Boltzmann-Verfahrens basiert auf regulären Gittern.
- Ähnlich wie bei der numerischen Behandlung anderer zeitabhängiger Probleme sind Raum- und Zeitschritt miteinander zu koppeln. Eine lokale Verfeinerung im Raum zieht somit eine Verkleinerung der "lokalen" Zeitschritte nach sich.
- Interpolation an hängenden Knoten.
- Parallelisierung des adaptiven Codes.

Die Ziele

Anwendungen in der Industrie

- Simulation von Füll- und Erstarrungsprozessen zur Qualitätsverbesserung von Gußteilen.
- Reduktion von Abfallprodukten.
- Erschließung neuer Märkte für Gießerzeugnisse.
- Verkürzung der mehrtägigen Rechenzeiten.
- Kooperation mit MAGMA, dem Marktführer für Gießerei-Software.
- Stärkung der Wettbewerbsposition der vorwiegend mittelständischen Gießereibetriebe.



Schnitt durch einen Verdichter (hier Temperaturverteilung)

Weitere Anwendungen

- Mehrphasenströmungen (Emulsionen).
- Strömungen in porösen Medien (Hydrologie, Textilien,...).
- Strömungen in komplizierten Geometrien.

UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN

itwm INSTITUT FÜR TECHNO- UND WIRTSCHAFTSMATHEMATIK

MAGMA

Kooperationspartner:
⋆: Universität Kaiserslautern, Fachbereich Mathematik.
†: Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik e. V..
‡: MAGMA Gießereitechnologie GmbH.

Kontakt und Projektleitung:
Prof. Dr. Willy Dörfler
Fachbereich Mathematik
Universität Kaiserslautern
Tel: 0631 205-4134
email: doerfler@mathematik.uni-kl.de