

Seminararbeit

Eine Gitterverfeinerungsmetrik für Lattice Boltzmann Methoden

Adrian Kummerländer

19. Juli 2018

Betreuung: Dipl.-Math. Markus Mohrhard

Fakultät für Mathematik

Karlsruher Institut für Technologie

Inhaltsverzeichnis

| 1 | Einf | ührung | 3 |
|---|------|---------------------------------------|----------------|
| | 1.1 | Warum Gitterverfeinerung? | 3 |
| | 1.2 | Warum eine Gitterverfeinerungsmetrik? | 3 |
| 2 | Gru | ndlagen | 4 |
| | 2.1 | Lattice Boltzmann Methode | 4 |
| | | 2.1.1 Implementierung | 7 |
| | | 2.1.2 Konvergenz gegen Navier-Stokes | $\overline{7}$ |
| | 2.2 | Verfeinerungsmethode | 8 |
| 3 | Gitt | erverfeinerungsmetrik | 9 |
| | 3.1 | Physikalischer Hintergrund | 9 |
| | 3.2 | Auftreten der Knudsen-Zahl in LBM | 9 |
| | 3.3 | Berechnung des Verfeinerungsfaktors | 11 |
| | 3.4 | Evaluierung | 12 |
| 4 | Imp | lementierung in OpenLB | 14 |

1 Einführung

1.1 Warum Gitterverfeinerung?

Die einfachsten und zugleich am weitesten verbreiteten Umsetzungen von Simulationen mit Lattice Boltzmann Methoden basieren auf uniformen Gittern, in denen Zellen immer den gleichen Abstand zu ihren Nachbarzellen haben.

Die Genauigkeit von Lattice Boltzmann basierenden Simulationen hängt maßgeblich von der Auflösung des verwendeten Gitters ab. Bei Außerachtlassung weiterer wichtiger Faktoren wie dem verwendeten Kollisionsterm und Randkonditionen kann im Allgemeinen davon ausgegangen werden, dass eine feinere Auflösung des Gitters zu besseren Ergebnissen führt.

In praktischen Beispielen können innerhalb eines Modells große Unterschiede in der Strömungskomplexität existieren. So kann es große Gebiete eines Modells geben, die mit einem vergleichsweise groben Gitter gut simuliert werden können, während in anderen Gebieten – beispielsweise in komplexen Geometrien und an Rändern – ein vielfach feineres Gitter zur adäquaten Behandlung benötigt wird. In uniformen Gittern muss jedoch das gesamte Modell unabhängig der lokalen Situation mit der maximal benötigten Auflösung abgebildet werden.

Da die Anzahl der benötigten Gitterpunkte sich maßgeblich auf den Speicherbedarf und Rechenaufwand auswirkt, ist es wünschenswert die Anzahl der Gitterpunkte zu minimieren. Ein Ansatz, dies zu erreichen, ist die lokale Variation der Gitterauflösung.

1.2 Warum eine Gitterverfeinerungsmetrik?

Um auf aufwendige und rein auf Intuition basierende manuelle Vorarbeit zur Aufteilung der Simulationsdomäne in variabel aufgelöste Teilgitter zu vermeiden, ist es wünschenswert, dies als automatischen Vorverarbeitungsschritt umzusetzen. Dabei ist jedoch nicht klar, auf welche Kriterien sich ein solcher Vorverarbeitungsschritt beziehen sollte.

Lagrava et al. entwickeln in "Automatic grid refinement criterion for lattice Boltzmann method" [1] ein solches, auf der *Knudsen-Zahl* basierendes, automatisches Kriterium zur Bewertung der nötigen Gitterverfeinerungsstufe in Teilgebieten der Simulationsdomäne. Es ist Ziel dieser Seminararbeit, die theoretischen Hintergründe dieses Kriteriums zu erarbeiten und die numerische Evaluation mit Hilfe einer eigenen Implementation zu reproduzieren.

2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden wir die [1] zugrunde liegende Lattice Boltzmann Methode in 2D nachvollziehen und auf die darauf aufbauende Verfeinerungsmethode [2] eingehen.

2.1 Lattice Boltzmann Methode

Grundlage und Namensgeber von Simulationen mit Lattice Boltzmann Methoden ist die Boltzmann Gleichung. Sie beschreibt das Verhalten von Gasen auf mesoskopischer Ebene als Verteilungsfunktion der Masse von Partikeln in einer Raumregion mit gegebener Geschwindigkeit.

Definition 2.1 (Die Boltzmann-Gleichung). Sei $f(x, \xi, t)$ die Verteilungsfunktion der Partikelmasse zu Zeit t in Ort $x \in \mathbb{R}^2$ mit Geschwindigkeit $\xi \in \mathbb{R}^2$, ρ die Dichte und $F \in \mathbb{R}^2$ eine etwaige äußere Kraft. Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die zeitliche Veränderung der Verteilungsfunktion anhand des totalen Differential $\Omega(f)$:

$$\left(\partial_t + \xi \cdot \partial_x + \frac{F}{\rho} \cdot \partial_\xi\right) f = \Omega(f) \left(= \partial_x f \cdot \frac{dx}{dt} + \partial_\xi f \cdot \frac{d\xi}{dt} + \partial_t f \right)$$

Hierbei handelt es sich um eine Advektionsgleichung wobei der Term $\partial_t f + \xi \cdot \partial_x f$ die Strömung der Partikelverteilung mit Geschwindigkeit ξ und $\frac{F}{\rho} \cdot \partial_{\xi} f$ einwirkende Kräfte darstellt. Der Term $\Omega(f)$ beschreibt, entsprechend als Kollisionsoperator bezeichnet, die kollisionsbedingte lokale Neuverteilung von f.

Zentrale Anforderung an den Kollisionsoperator ist die Impuls- und Masseerhaltung. Die im Folgenden betrachtete Lattice Boltzmann Methode verwendet die übliche BGK Approximation der Boltzmann-Gleichung ohne äußere Kraft von Bhatnagar, Gross und Krook (siehe *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice* [3, Kap. 3.5.3]).

Grundlegendes Element dieser Approximation ist der BGK Operator

$$\Omega(f) := -\frac{f - f^{\rm eq}}{\tau} \Delta t$$

welcher die Partikelverteilung mit Rate τ gegen eine Equilibriumsverteilung f^{eq} relaxiert. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit setzen wir dabei im Folgenden $\Delta t = 1$.

Wenden wir den BGK Operator auf die Boltzmann-Gleichung ohne äußere Kräfte an, erhalten wir die BGK Approximation:

Definition 2.2 (BGK Approximation). Set $\tau \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ eine Relaxionszeit und f^{eq} die von der Maxwell-Boltzmann Verteilung gegebene Equilibriumsverteilung.

$$(\partial_t + \xi \cdot \nabla_x)f = -\frac{1}{\tau}(f(x,\xi,t) - f^{eq}(x,\xi,t))$$

An dieser Stelle bemerken wir, dass die BGK Approximation für beliebige $\xi \in \mathbb{R}^2$ definiert ist. Da wir die LBM auf einem endlichen Rechner umsetzen wollen, müssen wir die Menge der betrachteten Geschwindigkeiten auf eine endliche Menge diskretisieren.

Eine übliche Menge diskreter Geschwindigkeiten in 2D ist D2Q9 wobei D2 die Anzahl der Dimensionen und Q9 die Anzahl der Geschwindigkeiten verschlüsselt.

2 Grundlagen



Abbildung 1: Umgebung einer Zelle in D2Q9

Definition 2.3 (D2Q9 Modell).

$$\{\xi_i\}_{i=0}^8 = \left\{ \begin{pmatrix} 0\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1\\1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1\\-1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\-1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1\\-1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \right\}$$

Mithilfe einer solchen endlichen Menge diskreter Geschwindigkeiten lässt sich die BGK Approximation bezüglich der Geschwindigkeit diskretisieren:

Definition 2.4 (BGK Geschwindigkeitsdiskretisierung). Seien ξ_i Vektoren einer Menge mikroskopischer Geschwindigkeiten wie z.B. D2Q9 und $f_i(x,t) \equiv f(x,\xi_i,t)$. Dann ist

$$(\partial_t + \xi_i \cdot \nabla_x) f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t))$$

die Diskretisierung der BGK Approximation entlang der Geschwindigkeiten.

Hierbei ist die diskrete Equilibriumsverteilung $f_i^{\rm eq}$ wie folgt definiert:

Definition 2.5 (Diskrete Equilibriumsverteilung). Seien $\rho \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ die Dichte, $u \in \mathbb{R}^2$ die Gesamtgeschwindigkeit, ξ_i die i-te diskrete Geschwindigkeitskomponente, ω_i das Gewicht jener Komponente bzgl. des Lattice und c_s die Lattice-Schallgeschwindigkeit.

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left(1 + \frac{u \cdot \xi_i}{c_s^2} + \frac{(u \cdot \xi_i)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right)$$

Die Werte von u = u(x,t) und $\rho = \rho(x,t)$ in Ort x zu Zeit t ergeben sich dabei aus den Momenten der Verteilungsfunktion f_i :

Definition 2.6 (Momente der Verteilungsfunktion).

$$\rho(x,t) = \sum_{i=0}^{q-1} f_i(x,t) \text{ und } \rho u(x,t) = \sum_{i=0}^{q-1} \xi_i f_i(x,t)$$

Für D2Q9 ergeben sich nach [3, Gl. 3.60 bzw. Tab. 3.3] die Gewichte:

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \ \omega_{2,4,6,8} = \frac{1}{9}, \ \omega_{1,3,5,7} = \frac{1}{36}$$

Weiter folgt zusammen mit der Bedingung $\sum_{i=1}^{q-1} \omega_i(\xi_i)_a(\xi_i)_b = c_s^2 \delta_{a,b}$ aus [3, Gl. 3.60] die Schallgeschwindigkeit $c_s = \sqrt{1/3}$ des Lattice. Konditionen zur Bestimmung dieser gitterspezifischen Konstanten sind hierbei die Erhaltung von Impuls und Masse sowie die Forderung von Rotationsisotropie.

Zur Entwicklung einer *implementierbaren* expliziten BGK Gleichung können wir nun die Geschwindigkeitsdiskretisierung 2.4 integrieren:

$$f_i(x+\xi_i,t+1) - f_i(x,t) = \int_0^1 \Omega_i(x+\xi_i s,t+s) ds$$

Wobei $\Omega_i(x,t)$ hier die diskrete Formulierung des BGK Kollisionsoperators darstellt:

$$\Omega_i(x,t) := -\frac{1}{\tau} (f_i(x,t) - f_i^{\text{eq}}(x,t))$$

Da sich die exakte Lösung des Integrals auf der rechten Seite schwierig gestaltet, wird es in der Praxis nur approximiert. Während es dazu vielfältige Ansätze gibt, beschränken wir uns an dieser Stelle auf Anwendung der Trapezregel:

$$f_i(x+\xi_i,t+1) - f_i(x,t) = \frac{1}{2} \left(\Omega_i(x,t) + \Omega_i(x+\xi_i,t+1) \right)$$

= $-\frac{1}{2\tau} \left(f_i(x+\xi_i,t+1) + f_i(x,t) - f_i^{\text{eq}}(x+\xi_i,t+1) - f_i^{\text{eq}}(x,t) \right)$

Zur expliziten Lösung dieser impliziten Gleichung benötigen wir nun nur noch eine geeignete Verschiebung von f_i und τ :

Definition 2.7 (Diskrete LBM BGK Gleichung). Seien $\overline{f_i}$ und $\overline{\tau}$ definiert:

$$\overline{f_i} = f_i + \frac{1}{2\tau} (f_i - f_i^{eq})$$
$$\overline{\tau} = \tau + \frac{1}{2}$$

Setzen wir diese verschobenen Variablen in das Ergebnis der Trapezregel ein, erhalten [3, Kap. A.5 mit $\Delta t = 1$] wir die die vollständig diskretisierte LBM BGK Gleichung:

$$\overline{f_i}(x+\xi_i,t+1) = \overline{f_i}(x,t) - \frac{1}{\overline{\tau}}(\overline{f_i}(x,t) - f_i^{eq}(x,t))$$

Bemerkenswert ist an dieser Stelle, dass die Momente der Verteilungen mit $\overline{f_i}$ analog zu 2.6 berechnet werden können:

$$\sum_{i=0}^{q-1} \overline{f_i} = \sum_{i=0}^{q-1} f_i + \frac{1}{2\tau} \sum_{i=0}^{q-1} (f_i - f_i^{eq}) = \rho$$
$$\sum_{i=0}^{q-1} \xi_i \overline{f_i} = \sum_{i=0}^{q-1} \xi_i f_i + \frac{1}{2\tau} \sum_{i=0}^{q-1} (f_i - f_i^{eq}) = \rho u$$

2 Grundlagen

2.1.1 Implementierung

Bei der Implementierung der diskreten LBM BGK Gleichung 2.7 auf einem Computer ist die Aufteilung in Kollisions- und Strömungsschritt üblich.

Definition 2.8 (Kollisionsschritt). Annäherung der Verteilungsfunktion an die lokal berechnete Equilibriumsverteilung entsprechend dem BGK Kollisionsoperator.

$$f_i^{out}(x,t) = f_i(x,t) - \frac{1}{\tau}(f_i(x,t) - f_i^{eq}(x,t))$$

Definition 2.9 (Strömungsschritt). Strömen der neuen Verteilungen auf die benachbarten Zellen entsprechend der jeweiligen diskreten Geschwindigkeit.

$$f_i(x+\xi_i,t+1) = f_i^{out}(x,t)$$

Bemerkenswert ist hierbei, dass der Kollisionsschritt nur lokale Informationen der jeweiligen Zelle benötigt und sich somit sehr gut zur parallelen Verarbeitung eignet.

2.1.2 Konvergenz gegen Navier-Stokes

Ziel der beschriebenen Lattice Boltzmann Methode ist die möglichst gute Approximation der schwach-kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen auf der Simulationsdomäne.

Definition 2.10 (Schwach-kompressible Navier-Stokes Gleichungen). Sei ρ die Dichte, u die Geschwindigkeit und p der Druck zu Zeit t sowie ν die kinematische Viskosität und S der Verzerrungstensor.

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0$$

$$\partial_t u + (u \cdot \nabla) u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + 2\nu \nabla \cdot (S)$$

Dabei sind Druck p, kinetische Viskosität ν und Verzerrungstensor S definiert als:

$$\begin{split} p &= c_s^2 \rho \\ \nu &= c_s^2 \tau \\ S &= \frac{1}{2} (\nabla u + (\nabla u)^\top) \end{split}$$

Nach [3, Kap. 4.1] kann die asymptotische Äquivalenz von LBM BGK Gleichung und schwach-kompressiblen Navier-Stokes Gleichungen mit der Entwicklung von Chapman-Enskog gezeigt werden. Diese wird auch in der theoretischen Begründung der Gitterverfeinerungsmetrik eine zentrale Rolle spielen.

2.2 Verfeinerungsmethode

Der in [1] entwickelten Gitterverfeinerungsmetrik liegt das in "Advances in Multi-domain Lattice Boltzmann Grid Refinement" [2] beschriebene Verfeinerungsverfahren der selben Autorengruppe zugrunde.

Das Verfahren basiert auf der Multi-Domain Herangehensweise [2, S. 4], bei welcher die feiner aufgelösten Teilbereiche der Simulationsdomäne aus dem gröber aufgelösten Gitter ausgeschlossen werden und sich nur in Übergangsbereichen überlappen.



Abbildung 2: Multi-Domain Herangehensweise mit Übergangsbereich [2, vgl. Abb. 3]

In diesen Übergangsbereichen, welche eine Breite von mindestens einer Einheit des gröberen Zellabstands haben, liegt die Hauptarbeit des Verfeinerungsverfahrens.



Abbildung 3: Skizze des Übergangsbereich [2, vgl. Abb. 4]

Während der Übergang vom feinen zum groben Gitter sich im Wesentlichen auf eine skalierte und gefilterte Restriktion der Verteilungen beschränkt, gestaltet sich der Übergang vom groben zum feinen Gitter aufwendiger, da Verteilungen unbestimmt sind und aus den gegebenen Daten interpoliert werden müssen.

Entsprechend liegt der Fokus des von Lagrava et al. entwickelten Algorithmus auf der Auswahl des Interpolationsverfahrens sowie der Skalierung der physikalischen Werte zwischen den unterschiedlich aufgelösten Verteilungen.

3 Gitterverfeinerungsmetrik

Kern des in [1] entwickelten Gitterverfeinerungskriteriums ist eine Beziehung zwischen Knudsen-Zahl und der lokalen Verteilungsfunktion:

$$\operatorname{Kn} \sim \frac{f^{\operatorname{neq}}}{f^{\operatorname{eq}}}$$

Dabei wird angenommen, dass der Fehler dieser Näherung umso kleiner ist, je feiner das der Simulation zugrunde liegende Gitter aufgelöst ist.

3.1 Physikalischer Hintergrund

Definition 3.1 (Knudsen-Zahl). Sei λ die mittlere freie Weglänge und L die charakteristische Länge des Systems. Die Knudsen-Zahl Kn ist definiert als:

$$Kn := \frac{\lambda}{L}$$

Die Knudsen-Zahl ist eine dimensionlose Kennzahl der Strömungslehre. Ihr Wert beschreibt, ob ein Gas als strömungsmechanisches Kontinuum nach Navier-Stokes oder als Bewegung einzelner Teilchen betrachtet werden kann [3, S. 14]:

 $\mathsf{Kn} \ll 1$ Strömungsmechanisches Kontinuum nach Navier-Stokes

 $\mathsf{Kn}\gtrsim 1\,$ Betrachtung einzelner Teilchen

3.2 Auftreten der Knudsen-Zahl in LBM

Definition 3.2 (Chapman-Enskog Ansatz).

$$f_i = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Zunächst setzen wir das, entsprechend dem Chapman-Enskog Ansatz als leicht gestörte Equilibriumsverteilung dargestellte, f_i in die diskretisierte BGK Approximation der Boltzmann Gleichung ein [1, adaptiert von Gl. (21)]:

$$(\partial_t + \xi_i \cdot \nabla_x) f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t))$$
$$(\partial_t + \xi_i \cdot \nabla_x) (f_i^{eq}(x, t) + \epsilon f_i^{(1)}(x, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2)) = -\frac{1}{\tau} (\epsilon f_i^{(1)}(x, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2))$$
$$\xi_i \cdot \nabla f_i^{eq} \sim \frac{1}{\tau} \epsilon f_i^{(1)}$$

Weiterhin gewinnen wir aus dem Chapman-Enskog Ansatz und der Dekomposition $f_i = f_i^{\text{eq}} + f_i^{\text{neq}}$ eine Näherung der Nicht-Equilibriumsverteilung unter Vernachlässigung von Termen in $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ [1, Gl. (23)]:

$$f_i^{\rm neq} \simeq \epsilon f_i^{(1)}$$

3 Gitterverfeinerungsmetrik

Diese Darstellung von f_i^{neq} zusammen mit der genäherten Beziehung $\frac{1}{\tau}\epsilon f_i^{(1)} \sim \xi_i \cdot \nabla f_i^{\text{eq}}$ können wir nun zur gesuchten Verknüpfung [1, Gl. (21)] zwischen Knudsen-Zahl und der Aufteilung der Verteilungsfunktion in Equilibriums- und Nicht-Equilibriumsanteil ausbauen:

$$\begin{split} \xi_i \cdot \nabla f_i^{\text{eq}} &\sim \frac{1}{\tau} \epsilon f_i^{(1)} & \text{Aus Chapman-Enskog Ansatz gewonnene Beziehung} \\ \frac{c_s}{N} f_i^{\text{eq}} &\sim \frac{1}{\tau} \epsilon f_i^{(1)} & \text{Gradient skaliert wie charakteristische Größe der Domäner} \\ \frac{c_s \tau}{N} &\sim \frac{\epsilon f_i^{(1)}}{f_i^{\text{eq}}} & \text{Invertieren mit Relaxionszeit} \\ \frac{\lambda}{L} &\sim \frac{\epsilon f_i^{(1)}}{f_i^{\text{eq}}} & \text{Übertragen aus Lattice-Einheiten} \\ & \text{Kn} &\sim \frac{f_i^{\text{neq}}}{f_i^{\text{eq}}} & \text{Ersetzen von genäherter Nicht-Equilibriumsverteilung} \end{split}$$

Um die Güte der durch Kn ~ $f_i^{\text{neq}}/f_i^{\text{eq}}$ gemessenen Knudsen-Zahl zwischen unterschiedlichen Gitterauflösungen sinnvoll vergleichen zu können, wollen wir die angestrebte theoretische Knudsen-Zahl unabhängig der Gitterauflösung fixieren.

Dies ist durch Fixieren der Mach- und Reynolds-Zahl möglich, da deren Quotient eine Darstellung¹ der Knudsen-Zahl ist [1, adaptiert von Gl. (27)]:

| $\operatorname{Kn} = \frac{\lambda}{L}$ | Definition der Knudsen-Zahl |
|--|--|
| $=\frac{c_s\tau}{N}$ | Übertragen in Lattice-Einheiten |
| $=rac{u_{ m lb}}{c_s}\cdotrac{c_s^2	au}{Nu_{ m lb}}$ | Erweitern mit $u_{\rm lb}c_s$ |
| $=rac{u_{ m lb}}{c_s}\cdotrac{ u_{ m lb}}{Nu_{ m lb}}$ | Ersetzen von Viskosität in Lattice-Einheiten |
| $=\frac{Ma}{Re}$ | Ersetzen von Ma = $\frac{u_{\rm lb}}{c_s}$ und Re ⁻¹ = $\frac{\nu_{\rm lb}}{u_{\rm lb}N}$ |

Mit den Relationen Kn ~ $f_i^{\text{neq}}/f_i^{\text{eq}}$ und Kn = Ma/Re haben wir nun die theoretischen Grundlagen der Gitterverfeinerungsmetrik gelegt und können im nächsten Abschnitt mit der Definition des Verfeinerungsfaktors forfahren.

¹i.A. gilt nach Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden [4, Kap. 1.4.2] Kn = Ma/Re $\cdot (\rho c_s \lambda)/\eta$ mit dynamischer Viskosität $\eta = \nu/\rho$. Siehe auch [3, Gl. (7.22)] für die Lattice Knudsen-Zahl.

3.3 Berechnung des Verfeinerungsfaktors

Wir definieren zunächst den Mittelwert über allen, aus dem Verhältnis Kn ~ $f_i^{\text{neq}}/f_i^{\text{eq}}$ hervorgehenden, Näherungen der Knudsen-Zahl in einem Teil des uniformen Gitters:

Definition 3.3 (Messung der mittleren Knudsen-Zahl). Seien q die Anzahl der Momente des zugrundeliegenden Gitters, $|R_{i,j}|$ die Anzahl der Gitterpunkte in Teilgebiet $R_{i,j}$ und f_k^{eq} sowie f_k^{neq} die Equilibriums- bzw. Nicht-Equilibriumsverteilung in Moment k des Gitterknotens $x \in R_{i,j}$.

$$C_{i,j} = \frac{1}{q} \frac{1}{|R_{i,j}|} \sum_{x \in R_{i,j}} \sum_{k=0}^{q-1} \left| \frac{f_k^{neq}}{f_k^{eq}} \right|$$

Im nächsten Schritt vergleicht der Verfeinerungsfaktor die gemittelte Messung mit der theoretischen Knudsen-Zahl Kn = Ma/Re:

Definition 3.4 (Verfeinerungsfaktor).

$$R_{i,j}^f = round\left(\log_2\left(\frac{C_{i,j}}{Kn}\right)\right)$$

Die Verwendung des binären Logarithmus liegt in dem verwendeten Verfeinerungsverfahren [2] begründet, welches Gitterübergänge im Verhältnis 1:2 ermöglicht. Werte des Verfeinerungsfaktors lassen sich als Aufforderung zur $R_{i,j}^{f}$ -maligen Verdoppelung der Knotendichte in Teilgebiet $R_{i,j}$ interpretieren.

Der komplette Ablauf zur Anwendung der Gitterverfeinerungsmetrik zur Analyse von Simulationen über uniformen Gittern ist in folgendem Algorithmus zusammengefasst:

- 1. Festlegen einer Auflösung der Simulationsdomäne R
- 2. Einteilen von R in $m \times n$ Teildomänen $R_{i,j}$ als Kandidaten zur Verfeinerung
- 3. Ausführen der Simulation über R
- 4. Berechnung des Verfeinerungsfaktors $R_{i,j}^f$ für die Teildomänen

Für eine vollständig automatische Anwendung des Kriteriums fehlen an dieser Stelle noch Heuristiken zur Aufteilung in die Teildomänen $R_{i,j}$ sowie zur Interpretation der Gitterverfeinerungsfaktoren im Rahmen der verwendeten Gitterverfeinerungsmethode.

3.4 Evaluierung

Zur numerischen Evaluierung der Gitterverfeinerungsmetrik verwenden die Autoren von [1] das verbreitete Problem des deckelgetriebenen Hohlraums². Grund für diese Wahl ist die stabile Lösbarkeit des Problems sowie die allgemeine Verbreitung als Testfall für numerische Strömungssimulation. Weiterhin stehen in "High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method" [5] detaillierte Vergleichswerte für dieses Beispiel zur Verfügung.



Abbildung 4: Aufbau des deckelgetriebenen Hohlraums

Zur Fixierung der Knudsen-Zahl werden die Reynolds-Zahl Re = 100 und die Deckelgeschwindigkeit $u_{\rm lb} = 0.01$ gesetzt. Dies ergibt Kn $\simeq 0.00017$ als angestrebte theoretische Knudsen-Zahl. Wir betrachtet nun die Verfeinerungsfaktoren im konvergenten Zustand für Auflösungen $N \in \{15, 30, 60, 120, 240\}$:

| 5 | 4 | 4 | 4 | 5 | | 4 | 3 | 3 | 3 | 4 | | 3 | 2 | 2 | 2 | 3 | | 2 | 1 | 1 | 1 | 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|---|---|---|---|---|----|---|---|---|---|-----|-----|---|---|-----|-----|-----|---|
| 3 | 3 | 2 | 3 | 4 | | 1 | 1 | 1 | 1 | 2 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 3 | | 1 | 0 | 0 | 1 | 2 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| N = 15 | | | | | - | | N | = | 30 | | - | | N | = | 60 | | - | | N | = 1 | 120 |) | | N : | = 2 | 240 |) |

Abbildung 5: Verfeinerungsfaktoren von 5×5 Blöcken

Wir erkennen, dass die Gitterverfeinerungsmetrik den größten Verfeinerungsbedarf jeweils nahe des Deckels und in den oberen Ecken feststellt. Diese Vorhersagen stimmen

²engl. lid-driven cavity. Ein quadratischer Hohlraum dessen Inhalt durch konstante Bewegung des Deckels in positive x-Richtung angetrieben wird.

überein mit den Bereichen größter Gradienten in Abbildung 4 sowie der Diskontinuität der Randkonditionen in den Ecken. Weiterhin ist eine Halbierung der vorgeschlagenen Blockauflösung bei Verdoppelung der Gesamtauflösung zu beobachten, was die gewählte Berechnung des Verfeinerungsfaktors in Definition 3.4 unterstützt.



Abbildung 6: Entwicklung von $C_{i,j}$ /Kn [1, Abb. 6]

Diese Beobachtung findet sich auch in obiger Abbildung der Entwicklung des faktorbestimmenden Verhältnisses zwischen gemessener und theoretischer Knudsen-Zahl bei logarithmischem Wachstum der Gitterauflösung wieder. Der Plot legt an dieser Stelle die Befolgung eines Potenzgesetzes mit Exponent -1 nahe.

Zur Betrachtung der mit Gitterverfeinerung möglichen Knoteneinsparung berechnen wir die Auflösung des nach Empfehlung der Metrik verfeinerten Gitters. Ohne Beachtung des Übergangsbereichs berechnet sich im Beispiel die Knotenanzahl eines verfeinerten Blocks mit Verfeinerungsfaktor R^f und Gesamtdomänenauflösung N als:

$$k_N(R^f) := \left(\frac{N}{5} \cdot 2^{R^f}\right)^2$$

Auf diese Weise ergibt sich z.B. für die verfeinerte Variante des N = 15 Gitters ein Einsparpotential von ~ 85% gegenüber des uniformen Gitters mit N = 480:

| N | $k_N(5)$ | $k_N(4)$ | $k_N(3)$ | $k_N(2)$ | $k_N(1)$ | $k_N(0)$ | Σ | $(480^2 - \Sigma)/480^2$ |
|-----|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--------------------------|
| 15 | 2 | 4 | 4 | 5 | 8 | 2 | 30978 | 0,866 |
| 30 | | 2 | 3 | 2 | 7 | 11 | 27900 | $0,\!879$ |
| 60 | | | 2 | 3 | 1 | 19 | 28656 | 0,876 |
| 120 | | | | 2 | 3 | 20 | 36864 | $0,\!840$ |
| 240 | | | | | 2 | 23 | 71424 | $0,\!690$ |

Tabelle 1: Knotenanzahl bei Umsetung der Verfeinerungsfaktoren

Zu bemerken ist an dieser Stelle, dass die berechneten Verfeinerungsfaktoren mit dem Verfeinerungsverfahren [2] i.A. nicht direkt umsetzbar sind, da nur Übergänge im Verhältnis 1 : 2 unterstützt werden. Entsprechend werden die Gitter in [1] manuell aus den Verfeinerungsfaktoren approximiert und der Vergleich mit den Referenzwerten von Ghia et al. [5] prüft nur eingeschränkt die Qualität der Metrik.

4 Implementierung in OpenLB

OpenLB [6] ist eine in C++ geschriebene Open Source Bibliothek zur Entwicklung von Lattice Boltzmann basierenden Simulationen. Neben der eigentlichen Bibliothek steht in OpenLB auch eine leicht anpassbare Implementierung des deckelgetriebenen Hohlraums auf einem D2Q9 Gitter mit BGK Kollisionsoperator zur Verfügung, was das Nachvollziehen der Ergebnisse von Lagrava et al. [1] erleichtert.

Zur Extraktion von Simulationsergebnissen wie Geschwindigkeiten, Fehlernormen oder Durchflussmengen aus den Verteilungsfunktionen sind *Messinstrumente* notwendig. In OpenLB werden solche Messinstrumente über das Konzept der *Funktoren* umgesetzt, welche als mathematische Abbildungen von den Verteilungen des Gitters in die Menge möglicher Messwerte betrachtet werden können.

Zur Unterstützung von Parallelisierung sowie in Hinblick auf zukünftige Gitterverfeinerung teilt OpenLB das Gitter bereits in eine konfigurierbare Anzahl von Blöcken auf. Entsprechend beschränkt sich die Implementierung der Gitterverfeinerungsmetrik in erster Linie auf zwei Funktoren:

- BlockLatticeKnudsen2D implementiert die Näherung von Zell-lokalen Knudsen-Zahlen aus Nicht-Equilibriumsverteilung und Equilibriumsverteilung.
- BlockLatticeRefinementMetricKnudsen2D berechnet auf dieser Grundlage den blockweiten Mittelwert der gemessenen Knudsen-Zahlen sowie den Verfeinerungsfaktor.

Um die Knudsen-Zahl sowie die Relaxionszeit des cavity2d Beispiels anhand von Reynolds-Zahl und Deckelgeschwindigkeit zu fixieren, wurde die Klasse UnitConverter um eine Methode getKnudsenNumber zur Berechnung der theoretischen Knudsen-Zahl ergänzt sowie createUnitConverter in Hinblick auf die Relaxionszeit erweitert.

Die Ausgabe der berechneten Näherungen der Knudsen-Zahl und der Verfeinerungsfaktoren erfolgt über die Standardschnittstelle von OpenLB in Form von VTK Dateien zur Betrachtung in ParaView.

Auf diese Weise wurden auch die in Abbildung 5 ersichtlichen Faktoren gewonnen. Unterschiede zu den Faktoren in [1, Abbildung 4] lassen sich dabei mit leicht unterschiedlichen Blockaufteilungen sowie Implementierungsdetails in OpenLB erklären und sind vernachlässigbar.

Literatur

- D. Lagrava, O. Malaspinas, J. Latt und B. Chopard. "Automatic grid refinement criterion for lattice Boltzmann method". In: ArXiv e-prints (Juli 2015). arXiv: 1507. 06767 [physics.flu-dyn].
- [2] D. Lagrava, O. Malaspinas, J. Latt und B. Chopard. "Advances in Multi-domain Lattice Boltzmann Grid Refinement". In: *Journal of Computational Physics* 231.14 (Mai 2012). ISSN: 0021-9991.
- [3] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva und E. M. Viggen. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Graduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 2017. ISBN: 978-3-319-44647-9.
- [4] D. Hänel. Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden. Springer Berlin Heidelberg, 2004. ISBN: 978-3-540-35047-7.
- [5] U. Ghia, K. N. Ghia und C. T. Shin. "High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method". In: *Journal of Computational Physics* 48 (Dez. 1982), S. 387–411. DOI: 10.1016/0021-9991(82)90058-4.
- [6] M.J. Krause, A. Mink, R. Trunk, F. Klemens, M.-L. Maier, M. Mohrhard, A. Claro Barreto, M. Haußmann, M. Gaedtke und J. Ross-Jones. *OpenLB Release 1.2: Open Source Lattice Boltzmann Code.* 2018. URL: http://www.openlb.net/download.