

Lattice-Boltzmann-Methode

Ausarbeitung zum CES-Seminarvortrag

Markus Frings (274290)

27. Juli 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zelluläre Automaten	2
3	Lattic-Gas-Automaten	2
3.1	FHP-I	3
4	Lattice-Boltzmann-Methode	5
4.1	Randbedingungen	8
5	Simulationsergebnisse	8
5.1	Lid-Driven-Cavity	8
5.2	Poiseuille-Strömung	9
6	Zusammenfassung	10

1 Einleitung

Die Lattice-Boltzmann-Methode ist ein Verfahren, das hauptsächlich zur Simulation inkompressibler Strömungen eingesetzt wird. Basis der Modellierung dieser Methode ist die Boltzmann-Gleichung. Dabei handelt es sich um eine Gleichung aus der kinetischen Gastheorie, die molekulare Stoßprozesse beschreibt. Der Algorithmus dieser Methode kommt aus dem Bereich der zellulären Automaten.

Die Lattice-Boltzmann-Methode ist damit eine einfach zu implementierende Methode,

mit der sich auf Basis der kinetischen Gastheorie kontinuumsmechanische Strömungsprobleme berechnen lassen.

Im Rahmen dieser Ausarbeitung wird zunächst das Prinzip der zellulären Automaten im Allgemeinen beschrieben. Danach wird auf eine spezielle Klasse dieser Automaten, die Lattice-Gas-Automaten, eingegangen. Im Besonderen wird dabei der FHP-I-Automat erläutert. Die Lattice-Gas-Automaten sind die Vorgänger der Lattice-Boltzmann-Methode, auf die in Abschnitt 4 eingegangen wird. In Abschnitt 5 werden einige Simulationsergebnisse vorgestellt, die mit der Lattice-Boltzmann-Methode berechnet wurden. Die Ausarbeitung schließt mit einer kurzen Zusammenfassung.

2 Zelluläre Automaten

Bei einem zellulären Automaten handelt es sich um ein Verfahren mit dem ein raum- und zeitdiskretes System modelliert werden kann. Der diskrete Raum ist dabei ein Gitter. Auf den Zellen dieses Gitters existieren verschiedene Zustände. Der zelluläre Automat berechnet aus den Zuständen zum Zeitpunkt t die Zustände zum Zeitpunkt $t + 1$. Dieser Zustandsübergang wird durch einfache logische oder algebraische Updateregeln beschrieben. Dabei basiert der Zustand einer Zelle zum neuen Zeitpunkt in der Regel nur auf dem eigenen Zustand und dem Zustand der Nachbarzellen zum alten Zeitpunkt.

Ein berühmtes Beispiel für einen zellulären Automaten ist das sogenannte „Conway’s Game Of Life“. Bei diesem Automaten können Zellen lebendig oder tot sein. Ob neue lebendige Zellen entstehen oder lebendige Zellen sterben oder der Zustand unverändert bleibt, hängt dabei nur von der Populationsdichte der Nachbarzellen ab. Dadurch können mittels sehr weniger einfacher Regeln bereits komplexe geometrische Figuren erzeugt werden, die sich z. B. periodisch wiederholen.

3 Lattice-Gas-Automaten

Der Lattice-Gas-Automat hat das Ziel Strömungsprobleme durch die Abbildung mit einem einfachen zellulären Automaten zu simulieren. Dabei werden mikroskopische Modelle aufgestellt, um mit diesen Lösungen zu generieren, die den kontinuumsmechanischen Navier-Stokes-Gleichungen genügen.

Bei den Lattice-Gas-Automaten wird das Rechengebiet in Raum und Zeit vollständig diskretisiert. Auf den Knoten des Gitters werden Partikel mit bestimmten Geschwindigkeiten betrachtet.

Im folgenden soll der sogenannte FHP-I Automat nach [1] vorgestellt werden.

3.1 FHP-I

Der FHP-I Automat ist auf einem hexagonalen Gitter definiert, wie es in Abbildung 1 zu sehen ist. Der Geschwindigkeitsraum ist so definiert, dass es sechs diskrete Geschwindigkeiten im dem selben Betrag $|\mathbf{c}|$ gibt. $|\mathbf{c}|$ ist dabei so gewählt, dass die Partikel in einem Zeitschritt von einem Knoten bis zu seinem Nachbarknoten wandern. An jedem Knoten des Gitters kann für jede Geschwindigkeitsrichtung maximal ein Partikel existieren. Diese Eigenschaft wird als „Exclusion Principle“ bezeichnet.

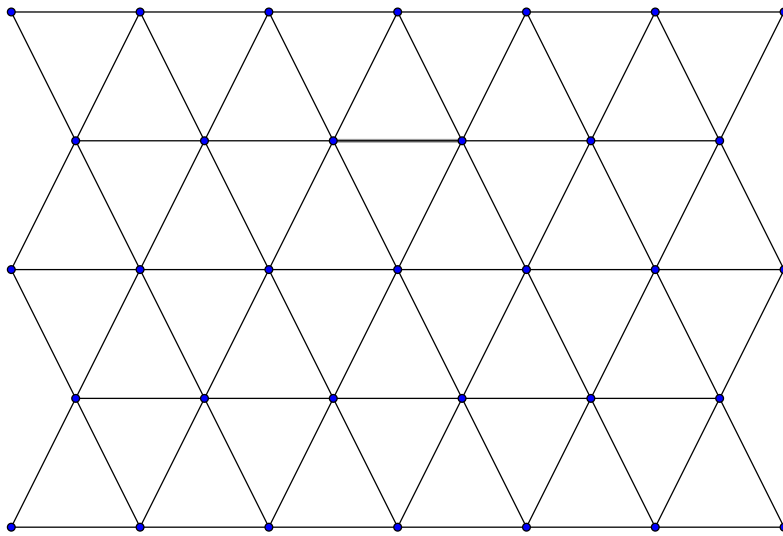


Abbildung 1: Gitterstruktur für FHP-I.

Die sechs diskreten Geschwindigkeitsrichtungen werden gegen den Uhrzeigersinn durchnummeriert. Um den Zustand an einem Knoten zu spezifizieren, werden sechs Bit benötigt, wobei jedes Bit eine Geschwindigkeitsrichtung repräsentiert. Eine 1 bedeutet, dass ein Partikel mit der entsprechenden Richtung existiert. Eine 0 bedeutet, dass kein Partikel existiert. Auf diese Weise lässt sich der Zustand des Automaten sehr speichereffizient beschreiben. Das „Exclusion Principle“ ist bei dieser Art der Darstellung implizit immer erfüllt.

In Abbildung 2 ist der schematische Ablauf der Automatenregeln dargestellt. Wobei Transport und Kollision durch die Gleichung

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \Delta_i \quad i = 1 \dots 6 \quad (1)$$

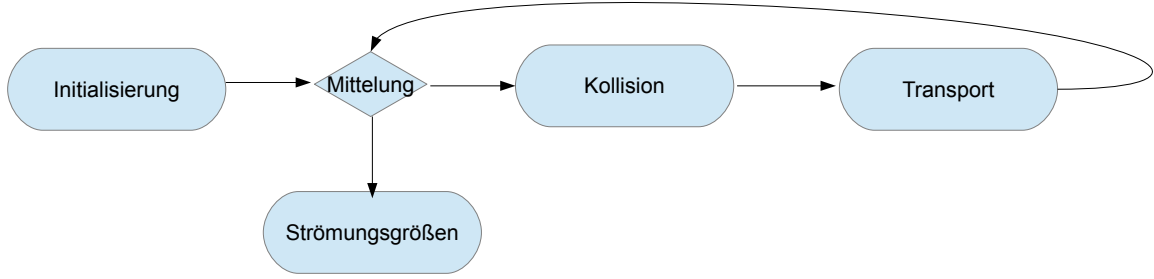


Abbildung 2: Schematischer Ablauf.

beschrieben werden. Dabei ist Δ_i als abstrakter Kollisionsoperator zu verstehen, der in einer noch näher zu bestimmenden Weise den Zustand am Knoten verändert. Die Strömungsgrößen werden über die Gleichungen

$$\rho = \sum_i N_i \quad (2)$$

und

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i N_i \mathbf{c}_i \quad (3)$$

aus der Partikelverteilung N_i berechnet.

Die Initialisierung geschieht bei bekannten Strömungsgrößen auf Basis der Gleichungen (2) und (3).

In [1] sind die folgenden Kollisionsregeln definiert, wobei die resultierenden Indizes mit *mod6* auf die Geschwindigkeitsrichtungen übertragen werden.

Für Kollisionen mit zwei Partikeln gilt $(i, i + 3)$ als Ausgangszustand. Dieser Zustand wird mit gleicher Wahrscheinlichkeit in die Zustände $(i + 1, i - 2)$ und $(i - 1, i + 2)$ umgewandelt. Diese sogenannten Head-On Kollisionen sind in Abbildung 3 dargestellt. Aus dieser Kollisionsregel resultiert ein stochastisches Verhalten des Automaten, da der Zustandsübergang nicht deterministisch ist.

Bei den Kollisionen mit drei Partikeln geht der Zustand $(i, i + 2, i - 1)$ in den Zustand $(i + 3, i + 1, i - 1)$ über. Diese Art der Kollision ist in Abbildung 4 dargestellt.

Alle übrigen Zustände bleiben bei dem FHP-I Automaten unverändert. Auf diese Weise bleiben Masse und Impuls erhalten. Auf Grund des stochastischen Verhaltens, müssen die Strömungsgrößen aus einer Mittelung über Ort oder Zeit bestimmt werden.

Es kann gezeigt werden, dass der FHP-I Automat eine Fermi-Dirac Gleichgewichts-

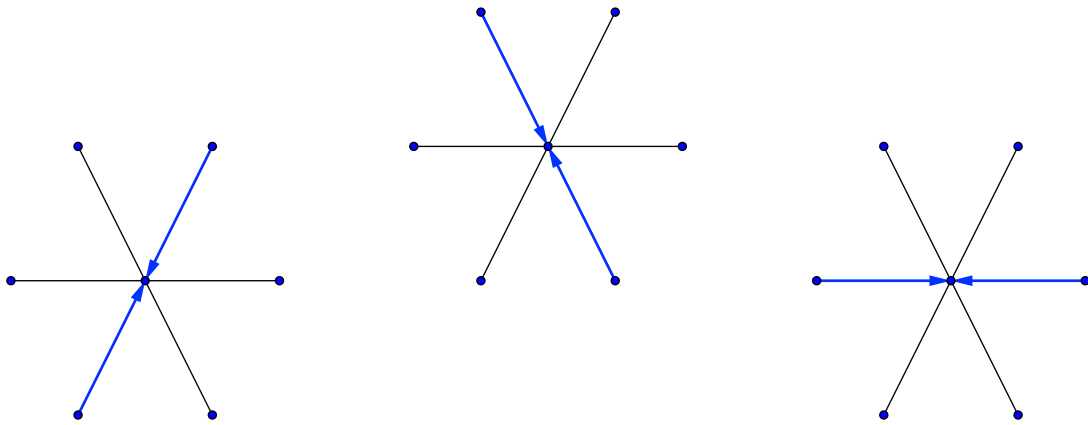


Abbildung 3: Head-On Kollision.

verteilung von der Form

$$N_i = \frac{1}{1 + \exp(\alpha(\rho u) + \beta(\rho u) \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})} \quad (4)$$

besitzt. Diese Gleichgewichtsverteilung kann für $\mathbf{u} = 0$ mittels der Taylor-Reihe entwickelt werden. Mit Hilfe einer Chapman-Enskog-Erweiterung können daraus die Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet werden. Daraus resultiert, dass der FHP-I Automat die Navier-Stokes-Gleichungen löst.

Der FHP-I Automat stellt damit eine sehr einfach zu implementierende Methode zur Strömungssimulation dar. Ein wesentlicher Vorteil ist die effiziente Darstellung der Zustände über 6-bit Zahlen. Ebenso lässt sich der Algorithmus sehr gut parallelisieren, da die Kollision lokal stattfindet und der Transport lediglich Informationen über die direkten Nachbarknoten benötigt.

Ein wesentlicher Nachteil ist das stochastische Verhalten des Automaten. Um ein sinnvolles Ergebnis zu erhalten muss über eine große Anzahl von Iterationen gemittelt werden.

4 Lattice-Boltzmann-Methode

Ziel der Lattice-Boltzmann-Methode ist es auf dem einfachen Prinzip der Lattice-Gas Automaten aufzubauen, aber Lösungen für die Probleme – insbesondere das stochastische Verhalten – zur Verfügung zu stellen.

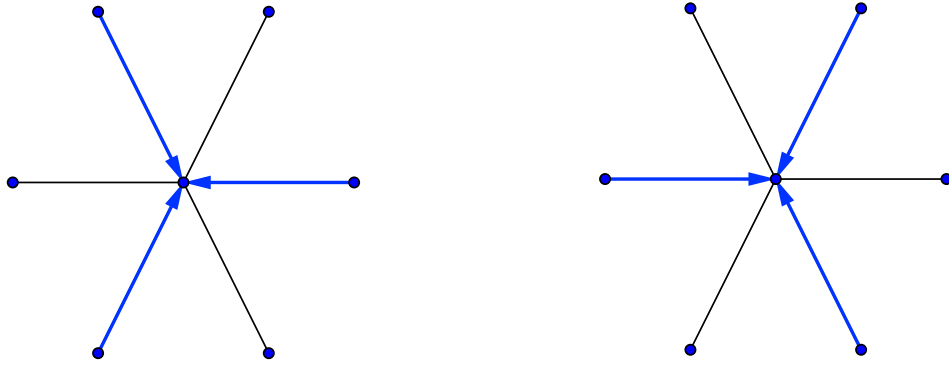


Abbildung 4: Dreierkollision.

Die Lattice-Boltzmann-Methode basiert auf einer Diskretisierung der BGK-Gleichung, welche eine Vereinfachung der Boltzmann-Gleichung ist. Gelöst wird die Gleichung

$$N_i(t + 1, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i) = (1 - \omega) N_i(t, \mathbf{x}) + \omega N_{ie}(t, \mathbf{x}). \quad (5)$$

Dabei ist die Gleichgewichtsverteilung

$$N_{ie}(t, \mathbf{x}) = t_p \rho \left(1 + \frac{c_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{c_{i\alpha} c_{i\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right). \quad (6)$$

Diese Verteilung basiert auf einer Taylor-Entwicklung der Maxwell-Verteilung.

Im Rahmen dieser Arbeit wird nur das D2Q9-Modell betrachtet, welches auch in [2] vorgestellt wird. Das D2Q9-Modell basiert auf einer Lattice-Struktur, wie sie in Abbildung 5 dargestellt ist.

Beim Vergleich der Gleichungen (1) und (6) fällt die starke Ähnlichkeit zwischen der Lattice-Boltzmann-Methode und den Lattice-Gas-Automaten auf. Im Unterschied zum Lattice-Gas-Automaten ist die Größe N_i bei der Lattice-Boltzmann-Methode eine skalare Größe, so dass die Mittelung zur Bestimmung der Strömungsgrößen nicht mehr notwendig ist. Die Strömungsgrößen werden bei der Lattice-Boltzmann-Methode ebenfalls nach den Gleichungen (2) und (3) berechnet.

Basierend auf der Erhaltung des Impulses und der Masse können für das D2Q9-Modell für t_p die Werte $t_0 = \frac{4}{9}$, $t_1 = \frac{1}{9}$ und $t_2 = \frac{1}{36}$ hergeleitet werden. Dabei steht der Index 0 für den Link 0, der Index 1 für die senkrechten und waagerechten Links und der Index 2 für die diagonalen Links. Die Geschwindigkeit c_i ist wieder so gewählt, dass der Transportschritt zwischen benachbarten Knoten stattfindet.

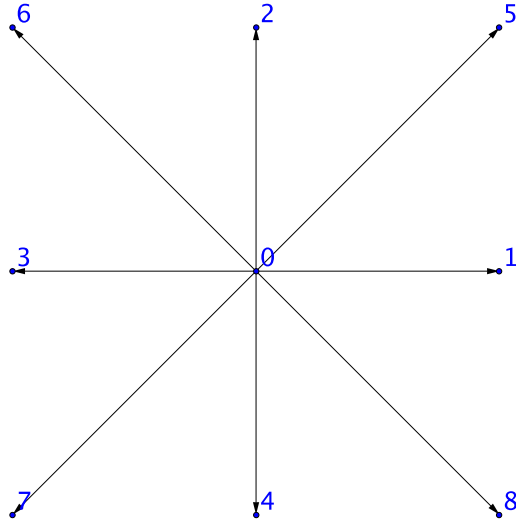


Abbildung 5: D2Q9 Lattice-Struktur.

Ebenfalls mit einer Chapman-Enskog-Entwicklung kann nachgewiesen werden, dass die Gleichung (6) für kleine Geschwindigkeiten auf die Navier-Stokes Gleichungen führt. Dabei kann eine Genauigkeit von zweiter Ordnung in der Geschwindigkeit nachgewiesen werden.

Die Schallgeschwindigkeit ergibt sich zu

$$c_s = \sqrt{\frac{1}{3}} \quad (7)$$

und die Viskosität ist über die Beziehung

$$\nu = \frac{1}{6} \left(\frac{2}{\omega} - 1 \right) \quad (8)$$

mit dem Relaxationsparameter ω gekoppelt. Aus Gleichung (8) wird klar, dass die Methode für $\omega \rightarrow 0$ in Strömungen mit $Re \rightarrow \infty$ und umgekehrt für $\omega \rightarrow 2$ in Strömungen mit $Re \rightarrow 0$ übergeht.

Obwohl die Lattice-Boltzmann-Methode der Berechnung inkompressibler Strömungen dient, ergeben sich aus Gleichung (2) Schwankungen in der Dichte. Damit diese Schwankungen kontrollierbar bleiben, ist die Methode nur für kleine Mach-Zahlen und kleine Knudsen-Zahlen gültig.

4.1 Randbedingungen

In dieser Ausarbeitung wurden zwei Arten von Randbedingungen verwendet. Diese sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

An den Wänden der Simulationsgebiete wurden sogenannte „Bounce-Back“ Randbedingungen verwendet. Dabei wird die Relaxation auf den Randknoten übersprungen und im Transportschritt werden die im vorherigen Transportschritt erhaltenen Werte wieder in das Rechengebiet zurück reflektiert. Auf diese Weise erhält man auf makroskopischer Ebene eine No-Slip Randbedingung, bei der die Wand in der Mitte der Zelle liegt.

An den Rändern, an denen Strömungsbedingungen vorgegeben werden, wird die Partikeldichte über die Gleichungen (2) und (3) berechnet. Dabei fehlen jedoch die Informationen über die in das Gebiet zeigenden Links, da diese im Transportschritt nicht bedient werden. Um die fehlenden Informationen zu Rekonstruieren wird nach [3] die „Bounce-Back“-Regel für den Nichtgleichgewichtsteil der Partikeldichte normal zur Wand angewendet. Das bedeutet z. B. für eine gegebene Normalgeschwindigkeit $u_n = 0$ und eine Randbedingung an der Oberseite des Rechengebiets $N_2 = N_4$.

5 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt sollen einige Simulationsergebnisse für zwei bekannte Benchmarkprobleme vorgestellt werden. Gerechnet wurden die Probleme mit einem in MATLAB geschriebenen D2Q9-Solver.

5.1 Lid-Driven-Cavity

Bei der Lid-Driven-Cavity handelt es sich um ein Problem entsprechend der Abbildung 6. Das Rechengebiet ist quadratisch durch die Länge L gegeben. An der Oberseite wird eine tangentielle Geschwindigkeit von $u_t = U$ aufgeprägt. Alle anderen Wandgeschwindigkeiten sind 0. Das Problem ist durch die Reynolds-Zahl gekennzeichnet. Diese wird aus

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (9)$$

berechnet.

Zur Simulation wurde ein Gitter mit 50x50 Zellen verwendet. Als Relaxationsparameter wurde $\omega = 0.75$ gewählt.

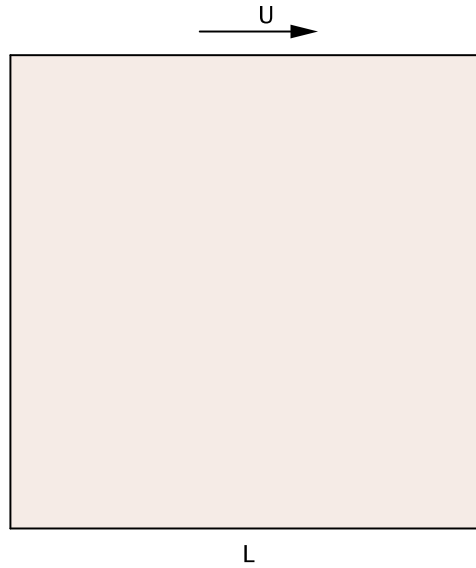


Abbildung 6: Lid-Driven-Cavity.

In den Abbildungen 7 und 8 ist das resultierende Geschwindigkeitsfeld für $Re = 10$ bzw. $Re = 100$ dargestellt. Dabei ist das typische Phänomen sichtbar, dass der große Wirbel für höhere Reynolds-Zahlen nach rechts wandert.

5.2 Poiseuille-Strömung

Bei der Poiseuille-Strömung handelt es sich um ein Strömungsproblem, für das eine analytische Lösung existiert. Dabei wird auf einen Kanal ein Druckgradient aufgebracht und an den Wänden eine No-Slip-Randbedingung. Das daraus resultierende Geschwindigkeitsprofil beschreibt eine Parabel nach der Gleichung

$$u(y) = \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right) (r^2 - y^2), \quad (10)$$

wobei $y = 0$ in der Mitte des Kanals liegt.

Dieser Testfall wurde auf einem 30x11 Gitter mit $\omega = 1$ gerechnet. Der aufgeprägte Druckgradient beträgt $\frac{\partial p}{\partial x} = 0.01$ und die Reynolds-Zahl $Re = 1.63$.

In Abbildung 9 ist das Geschwindigkeitsfeld für diesen Testfall abgebildet. Ein Vergleich der mit der Lattice-Boltzmann-Methode berechneten Lösung und der analytischen Lösung nach Gleichung (10) ist in Abbildung 10 dargestellt. Die Abweichungen in der

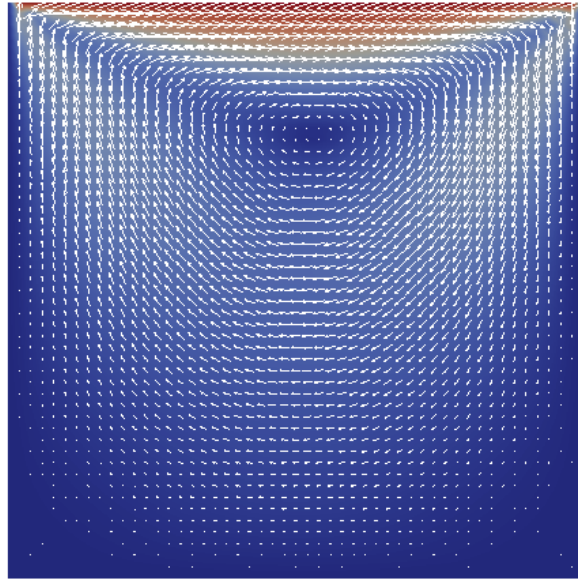


Abbildung 7: Lid-Driven-Cavity für $Re = 10$.

berechneten Lösung am Kanalrand werden dadurch verursacht, dass die makroskopische Geschwindigkeit für die Randknoten auf $u = 0$ gesetzt wird. Wie oben beschrieben, befinden sich diese Knoten jedoch schon außerhalb des Rechengebietes. Es handelt sich dabei also lediglich um ein Darstellungsproblem auf Grund der ungünstigen Wandposition bei der „Bounce-Back“-Randbedingung.

Im Gesamten zeigt das simulierte Ergebnis sehr gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung.

6 Zusammenfassung

Die im Rahmen dieser Seminararbeit betrachtete Lattice-Boltzmann-Methode ist ein einfach zu implementierendes Verfahren zur Strömungssimulation. Das Verfahren basiert auf den einfachen Algorithmen der zellulären Automaten und hat seine physikalischen Grundlagen in der kinetischen Gastheorie.

Als Vorteil der Methode kann genannt werden, dass die einfache Struktur der Methode sehr gut geeignet ist um das Verfahren zu parallelisieren. Durch die einfache „Bounce-Back“-Randbedingung ist eine Behandlung komplexer Simulationsgebiete einfach möglich.

Trotzdem ist ein entscheidender Nachteil der Methode die Notwendigkeit der struktu-

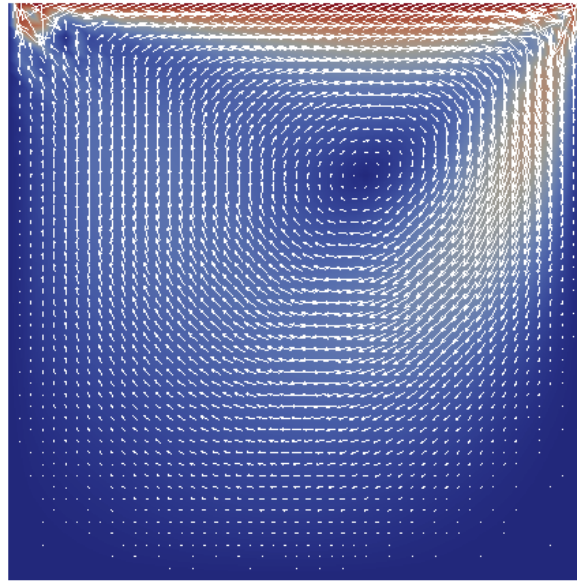


Abbildung 8: Lid-Driven-Cavity für $Re = 100$.

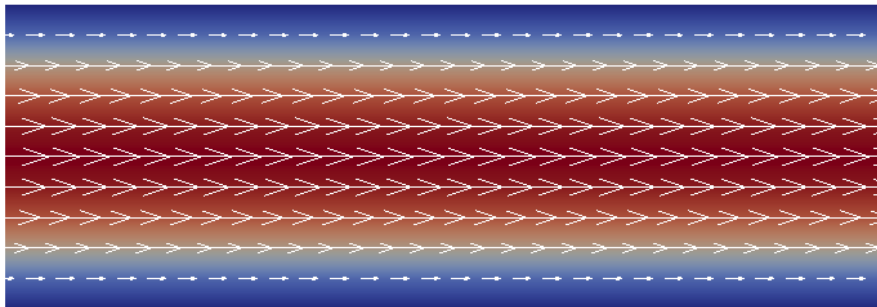


Abbildung 9: Geschwindigkeitsfeld.

rierten Gitter. Eine Erweiterung auf andere Gitterformen ist nur schwer möglich. Ebenso kann für die Lattice-Boltzmann-Methode kein H-Theorem gezeigt werden, wodurch sie im Gegensatz zu den Lattice-Gas-Automaten nicht uneingeschränkt stabil ist.

Zusammenfassend lässt sich die Methode als sehr effizientes Verfahren zur Strömungssimulation beschreiben, das jedoch auch Probleme im Bereich der Flexibilität der Gitter und der Stabilität aufweist.

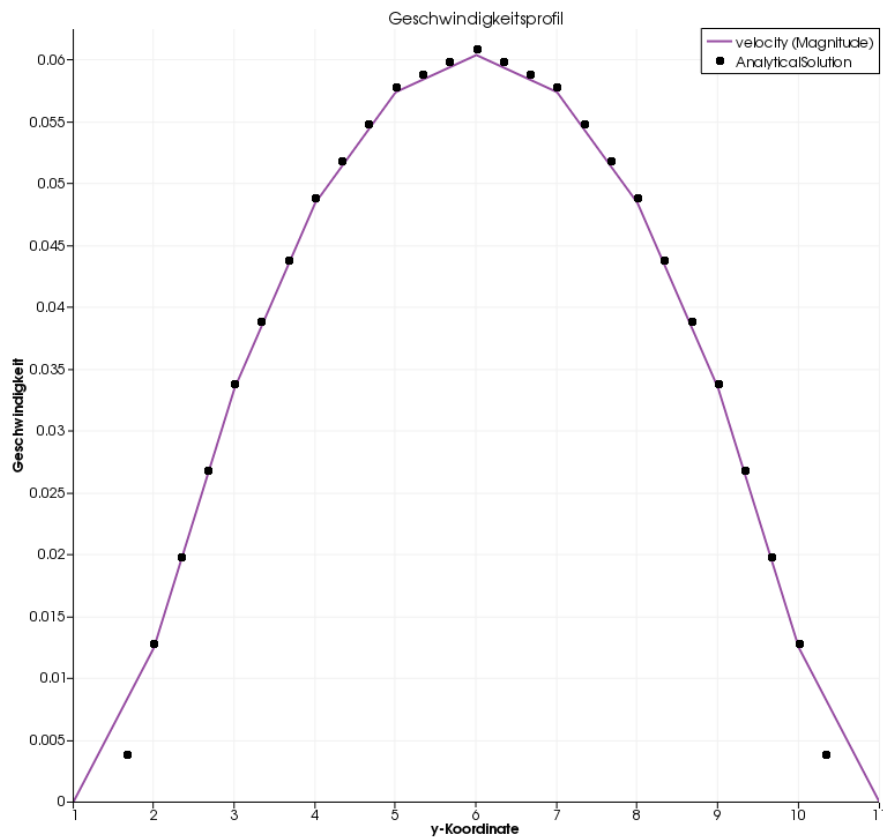


Abbildung 10: Geschwindigkeitsprofil.

Literatur

- [1] U. Frisch, B Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. *Physical Review Letters*, 1986.
- [2] Y. H. Qian, D. d’Hummières, and P. Lallemand. Lattice bgk models for navier-stokes equation. *Europhysics Letters*, 1992.
- [3] Q. Zou and X. He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Physics Of Fluids*, 1997.