

*Dominik Wilde*

**Lattice-Boltzmann-Verfahren  
hoher Ordnung  
zur Simulation  
kompressibler Strömungen**

*Herausgeber: Holger Foyssi und Thomas Seeger*

**Schriftenreihe des Lehrstuhls für  
Strömungs- und Thermodynamik**

**Band 9**



# Lattice-Boltzmann-Verfahren hoher Ordnung zur Simulation kompressibler Strömungen

dem Fachbereich Maschinenbau  
der Universität Siegen  
zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)**

vorgelegte Dissertation  
von

**Dominik Wilde**

aus  
Euskirchen

Hauptreferent:	Prof. Dr.-Ing. H. Foysi
Koreferenten:	Prof. Dr. rer. nat. D. Reith Priv.-Doz. Dr. rer. nat. M. Krause
Vorsitzender:	Prof. Dr.-Ing. P. Kraemer
Dekan:	Prof. Dr. H. Schönherr
Tag der Einreichung:	13.12.2022
Tag der mündl. Prüfung:	14.06.2023

Siegen, Juni 2023

Gedruckt auf alterungsbeständigem holz- und säurefreiem Papier

**Impressum**

Prof. Dr.-Ing. Dipl.-Phys. Holger Foyi

Lehrstuhl für Strömungsmechanik

Universität Siegen

57068 Siegen

Band 9

Zugl.: Siegen, Univ., Diss. 2023

# Danksagung

Es braucht ein ganzes Dorf, um ein Kind zu erziehen... und um eine Dissertation zu schreiben.

Großer Dank gebührt gleichermaßen meinen Betreuern Prof. Dr.-Ing. Holger Foysi der Universität Siegen und Prof. Dr. Dirk Reith der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, die mir beide mit ihrer außerordentlichen Weitsicht die Promotion im Anschluss an die Dienstzeit in der Bundeswehr ermöglicht haben und mich mit ihren Anregungen stets zu innovativen Ergebnissen angespornt haben. Rückblickend kann ich Prof. Dr. Bernhard Möglinger gar nicht genug dafür danken, dass er seinerzeit den Kontakt zu Herrn Reith hergestellt hat. Herrn Priv.-Doz. Dr. Mathias Krause danke ich für die schnelle Zusage, das Koreferat der Arbeit zu übernehmen.

Meine treuen Wegbegleiter und Koautoren Mario Bedrunka, Dr. Andreas Krämer und Dr.-Ing. Knut Küllmer standen mir mit ihrem Rat immer zur Seite und ich denke mit Freude an die vielen gemeinsamen Stunden an der Hochschule und auf den Konferenzen zurück. Hierfür ein herzliches Dankeschön!

Für die Gastfreundschaft und lehrreichen Monate an der UC San Diego bedanke ich mich aufrichtig bei Prof. Dr. Sutanu Sarkar und allen Mitarbeitern seiner Arbeitsgruppe.

Allen Kollegen und Studierenden an der Universität und der Hochschule danke ich für interessante Diskussionen. Dank gilt auch der Deutschen Forschungsgemeinschaft, deren Förderung (FO 674/17-1) mir erlaubte, mich während der zurückliegenden Jahre voll auf die Forschung zu konzentrieren. Außerdem danke ich dem Deutschen Akademischen Austauschdienst, sowie dem TREE-Institut und dem Graduierteninstitut der Hochschule-Bonn-Rhein-Sieg für ihre facettenreiche Unterstützung. Auch die Bundeswehr hat durch die finanzielle Unterstützung sowie durch die umfassende Ausbildung zum Gelingen dieses Projektes beigetragen.

Bei all meinen Freunden bedanke ich mich für ihre Unterstützung, ihre Geduld und ihr Verständnis, dass Feste ohne mich gefeiert und Häuser ohne mich gebaut werden mussten.

Zum Schluss danke ich meiner gesamten Familie. Meinen Kindern danke ich für ihre Nachsicht, dass ihr Papa ab und zu mit den Gedanken an anderer Stelle war und zuletzt meiner Ehefrau Jenny, die mir in allen Lebenslagen Rückhalt gibt, auf die ich mich immer verlassen kann und mit der ich zusammen alle Klippen umschiffe.



# Abstract

In this thesis, a compressible semi-Lagrangian lattice Boltzmann method is newly developed and tested. The lattice Boltzmann method is a rapidly advancing numerical method for computational fluid dynamics. However, in its original form, the lattice Boltzmann method is limited to weakly compressible flows with low Mach number. Previous attempts to extend the lattice Boltzmann method to supersonic flows suffered either from poor stability, from impractically large velocity sets, or from small time step sizes. As an alternative to previous approaches, a semi-Lagrangian streaming step is used in this work. Semi-Lagrangian methods decouple the spatial, time, and velocity space discretization of the original lattice Boltzmann method by interpolation during the streaming step.

Following the introduction, the second and third chapters of this thesis first detail the basics of the lattice Boltzmann method and list previous approaches to simulate compressible flows. Subsequently, the compressible semi-Lagrangian lattice Boltzmann method is developed and described.

In the fourth chapter of the thesis, new cubature-based velocity sets are developed and tested, including a D3Q45 velocity set for the computation of compressible flows, which significantly reduces the computational cost compared to conventional velocity discretizations.

In the fifth chapter of the thesis, simulations of one-dimensional shock tubes, two-dimensional Riemann problems, and shock-vortex interactions are performed for validation. Thereafter, simulations of compressible Taylor-Green vortices as well as wall-bounded problems demonstrate the advantages of the method for compressible flow simulations. The latter include the supersonic flow around a two-dimensional NACA-0012 profile and around a three-dimensional sphere as well as a supersonic channel flow. The simulation section is followed by an extensive discussion of the semi-Lagrangian lattice Boltzmann method in comparison to other methods. The advantages of the method include comparatively large time step sizes, compatibility with body-fitted meshes, and the intrinsic stability of the method even without artificial viscosity.





# Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird eine kompressible Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode neu entwickelt und erprobt. Die Lattice-Boltzmann-Methode ist ein Verfahren zur numerischen Strömungssimulation, das auf einer Modellierung von Partikeldichten und deren Interaktion untereinander basiert. In ihrer Ursprungsform ist die Methode jedoch auf schwach kompressible Strömungen mit niedriger Machzahl beschränkt. Wesentliche Nachteile der bisherigen Versuche zur Erweiterung auf supersonische Strömungen sind entweder mangelhafte Stabilität der Verfahren, unpraktikabel große Geschwindigkeitssätze oder die Beschränktheit auf kleine Zeitschrittweiten. Als Alternative zu bisherigen Ansätzen wird in dieser Arbeit ein Semi-Lagrangescher Strömungsschritt eingesetzt. Semi-Lagrangesche Verfahren entkoppeln mittels Interpolation die Orts-, Zeit- und Geschwindigkeitsdiskretisierung der ursprünglichen Lattice-Boltzmann-Methode.

Nach der Einleitung wird im zweiten und dritten Kapitel dieser Arbeit zunächst auf die Grundlagen und Prinzipien der Lattice-Boltzmann-Methode eingegangen sowie bisherige Ansätze zur Simulation kompressibler Strömungen aufgeführt. Im Anschluss wird die kompressible Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode entwickelt und beschrieben. Die Erweiterung erfolgt im Wesentlichen durch die Verknüpfung der Methode mit geeigneten Gleichgewichtsfunktionen und Geschwindigkeitssätzen. Im vierten Kapitel der Arbeit werden neue Kubatur-basierte Geschwindigkeitssätze entwickelt und getestet, darunter ein D3Q45-Geschwindigkeitssatz zur Berechnung kompressibler Strömungen, der den Rechenaufwand gegenüber konventionellen Geschwindigkeitsdiskretisierungen erheblich verringert.

Im fünften Kapitel der Arbeit werden zur Validierung Simulationen von eindimensionalen Stoßrohren, zweidimensionalen Riemann-Problemen und Stoß-Wirbel-Interaktionen durchgeführt. Im Anschluss zeigen Simulationen von dreidimensionalen, kompressiblen Taylor-Green-Wirbeln sowie von wandgebundenen Testfällen die Vorteile der Methode für kompressible Strömungssimulationen. Zu diesem Zweck werden die Überschallströmung um ein zweidimensionales NACA-0012-Profil und um eine dreidimensionale Kugel sowie eine supersonische Kanalströmung untersucht. Dem Simulationsteil folgt eine umfangreiche Diskussion der Semi-Lagrangeschen Lattice-Boltzmann-Methode im Vergleich zu anderen Methoden. Die Vorteile der Methode, wie vergleichsweise große Zeitschrittweiten, körperangepasste Netze und die Stabilität der Methode, werden hier herausgearbeitet.



# Inhaltsverzeichnis

---

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Die Lattice-Boltzmann-Methode</b>	<b>9</b>
2.1	Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	9
2.2	Boltzmann-Gleichung und Diskretisierung . . . . .	10
2.3	Grundlagen der Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	15
2.3.1	Projektion der Verteilungen auf eine Hermite-Basis . . . . .	16
2.3.2	Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums . . . . .	19
2.3.3	Integration entlang der Charakteristiken . . . . .	22
2.4	Überrelaxation der Verteilungsfunktionen . . . . .	24
2.5	Fehlerbetrachtung der Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	25
2.6	Zeitintegration mit linearen Mehrschrittverfahren . . . . .	26
2.7	Alternative Kollisionsoperatoren . . . . .	29
2.8	Vor- und Nachteile der klassischen Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	31
<b>3</b>	<b>Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode für kompressible Strömungen</b>	<b>35</b>
3.1	Kompressible Löser auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	35
3.2	Stand der Technik kompressibler Lattice-Boltzmann-Methoden . . . . .	37
3.3	Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode . . . . .	44
3.3.1	Polynomielle Gleichgewichtsverteilung vierter Ordnung . . . . .	48
3.3.2	Variabler Isentropenexponent . . . . .	48
3.3.3	Variable Prandtlzahl . . . . .	49

3.3.4	Chapman-Enskog-Analyse der SLLBM . . . . .	50
3.3.5	Fehleranalyse der kompressiblen SLLBM . . . . .	50
3.4	Randbedingungen der Semi-Lagrangeschen LBM . . . . .	50
3.4.1	Gleichgewichtsrandbedingungen . . . . .	52
3.4.2	Bounce-Back-Randbedingungen . . . . .	52
3.4.3	Auslassrandbedingungen . . . . .	54
3.5	Zusammenfassung . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Effiziente Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums</b>	<b>55</b>
4.1	Numerische Quadraturen hohen Grades . . . . .	56
4.1.1	Newton-Cotes-Quadratur . . . . .	56
4.1.2	Gauß-Hermite-Quadratur . . . . .	56
4.2	Multivariate Quadraturen . . . . .	58
4.2.1	Produktregel . . . . .	58
4.2.2	Kubaturregeln . . . . .	60
4.2.3	Geschwindigkeitsdiskretisierungen für On-Lattice-Boltzmann-Methoden . . . . .	63
4.2.4	Test der Symmetriebedingungen . . . . .	64
4.3	Boltzmann-Verfahren hoher Ordnung für verdünnte Strömungen . . .	67
4.4	Zusammenfassung . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Simulationen kompressibler Strömungen</b>	<b>71</b>
5.1	Validierung . . . . .	71
5.1.1	Bewegte Dichteschwankung . . . . .	71
5.1.2	Test der Galileischen Invarianz . . . . .	72
5.1.3	Test des Temperaturbereichs . . . . .	74
5.2	Eindimensionales Riemann-Problem und Stoßrohr . . . . .	75
5.3	Simulationen zweidimensionaler kompressibler Probleme . . . . .	77
5.3.1	Zweidimensionales Riemann-Problem . . . . .	77
5.3.2	Stoß-Wirbel-Interaktion . . . . .	80
5.3.3	Viskose, supersonische 2D-Umströmung eines NACA-0012-Tragflächenprofils . . . . .	84
5.4	Simulation dreidimensionaler Strömungen . . . . .	89

---

5.4.1	Quasi-inkompressibler dreidimensionaler Taylor-Green-Wirbel	89
5.4.2	Kompressibler dreidimensionaler Taylor-Green-Wirbel . . . . .	92
5.4.3	Super- und transsonische Kugelanströmung . . . . .	98
5.4.4	Supersonische Kanalströmung . . . . .	102
<b>6</b>	<b>Diskussion und Zusammenfassung</b>	<b>109</b>
6.1	Zusammenfassung . . . . .	109
6.2	Diskussion und Ausblick . . . . .	111
<b>A</b>	<b>Chapman-Enskog-Entwicklung</b>	<b>117</b>
<b>B</b>	<b>Off-Lattice Geschwindigkeitssätze</b>	<b>123</b>



# Symbolverzeichnis

---

## Lateinische Symbole

$a^{(n)}$	Koeffizienten bzw. Momente der Hermite-Transformation
$a_{\text{eq}}^{(n)}$	Koeffizienten bzw. Momente der Hermite-Transformation im Gleichgewicht
$\mathbf{A}$	Advektionsmatrix
$c_s$	Gitterkonstante
$C_p$	Wärmekapazität bei konstantem Druck
$C_v$	Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$D$	Räumliche Dimension
$E$	Totale Energie
$f$	Verteilungsfunktion
$f_i$	Diskrete Verteilungsfunktion der diskreten Geschwindigkeit $\xi_i$
$\hat{f}_{i\Xi_j}$	Diskrete Verteilungsfunktion der diskreten Geschwindigkeit $\xi_i$ an der Stützstelle $\mathbf{x}_j$ der Zelle $\Xi$
$\bar{f}_i$	Transformierte, diskrete Verteilungsfunktion
$f^{\text{eq}}$	Maxwell-Boltzmann-Verteilung
$f_i^{\text{eq}}$	Maxwell-Boltzmann-Verteilung der diskreten Geschwindigkeit $\xi_i$
$f_i^*$	Quasi-Equilibriumsverteilung der diskreten Geschwindigkeit $\xi_i$
$\mathbf{F}$	Volumenkraft
$g_i$	Zweite diskrete Verteilungsfunktion zur Berücksichtigung der molekularen Freiheitsgrade der Rotation und Vibration
$h_i$	Stellvertretend für $f_i$ und $g_i$
$H$	H-Funktion nach Boltzmann
$\mathcal{H}^{(n)}$	Hermitepolynom n-ter Ordnung
$\text{Kn}$	Knudsenzahl
$l_f$	Mittlere freie Molekülweglänge

## Fortsetzung lateinische Symbole

$l^+$	Längenskala des turbulenten Kanals
$L$	(Charakteristische) Länge
$\mathcal{M}$	Ordnung des Mehrschrittverfahrens
$\mathbf{M}$	Transformationsmatrix des Multi-Relaxation-Time-Kollisionsoperators
Ma	Machzahl
$n$	Ordnung des Hermitepolynoms
$N$	Expansionsordnung des Gleichgewichts
$p$	Ordnung der Ansatzfunktionen
$P$	Druck
Pr	Prandtlzahl
$\mathcal{Q}$	Wärmeﬂusstensor
$\bar{\mathcal{Q}}$	Zentraler Wärmeﬂusstensor
$\mathcal{R}$	Tensor der Momente vierter Ordnung
$R$	Spezifische Gaskonstante
Re	Reynoldszahl
$Re_\tau$	Schubspannungsreynoldszahl
$t$	Zeit
$\mathbf{u}$	Makroskopische Geschwindigkeit
$u_{vD}$	Van-Driest-transformierte Geschwindigkeit
$T$	Temperatur
$w_i$	Gewicht der Quadratur
$\mathbf{x}$	Ortsvektor



## Griechische Symbole

$\hat{\alpha}$	Temperaturleitfähigkeit
$\gamma$	Isentropenexponent
$\delta$	Kronecker-Delta
$\delta_c$	Halbe Kanalhöhe
$\delta_t$	Zeitschrittweite
$\delta_x$	Gitterweite
$\Delta$	Variable der Symmetriebedingungen
$\zeta$	Variable entlang der Charakteristiken
$\eta$	Volumenviskosität
$\theta$	Relative Temperatur
$\Theta$	Wert der Symmetriebedingung
$\iota$	Restdistanz von der Wand zum Departure-Point bei der Bounce-Back-Randbedingung
$\kappa$	Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$	Relaxationszeit
$\Lambda_{pqr}$	Lagrange-Multiplikatoren
$\mu$	Dynamische Viskosität
$\nu$	Kinematische Viskosität
$\xi$	Partikelgeschwindigkeit
$\xi_i$	Diskrete Partikelgeschwindigkeit
$\Pi$	Spannungstensor
$\rho$	Dichte
$\rho_b$	Gemittelte Dichte des turbulenten Kanals
$\sigma$	Spannungstensor
$\tau$	Dimensionsloser Relaxationsparameter
$\tau_w$	Wandschubspannung
$\Psi_i$	Advektionsmatrix zu diskreter Geschwindigkeit $i$
$\Omega$	Kollisionsoperator
$\omega$	Gewichtsfunktion

## Symbole in Fraktur

$\mathfrak{N}$	Grad der Quadratur
----------------	--------------------



# Abkürzungsverzeichnis

---

AM	Adams-Moulton-Verfahren
BDF	Backward-Differentiation-Formula
BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
CFD	Computational-Fluid-Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
DNS	Direkte numerische Simulation
DSMC	Direct-Simulation-Monte-Carlo
DUGKS	Discrete-Unified-Gas-Kinetic-Scheme
DVM	Discrete-Velocity-Method
GKS	Gas-Kinetic-Scheme
LBM	Lattice-Boltzmann-Methode(n)
LES	Large-Eddy-Simulation
MRT	Multiple-Relaxation-Time
PonD	Particles-on-Demand(-Methode)
RANS	Reynolds-Averaged-Navier-Stokes
SLLBM	Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode(n)
SRT	Single-Relaxation-Time
TRT	Two-Relaxation-Time
UGKS	Unified-Gas-Kinetic-Scheme
WENO	Weighted-Essentially-Non-Oscillatory



# 1 Einleitung

---

*“It is no use saying, ‘We are doing our best.’  
You have got to succeed in doing what is necessary.”*

– Winston Churchill

Die traditionell innovative Ingenieurdisziplin der Luft- und Raumfahrttechnik ist ein wesentlicher Treiber der Entwicklung und Anwendung von Methoden der numerischen Strömungsmechanik. In der kommerziellen Luftfahrt beispielsweise können kleine Verbesserungen der aerodynamischen Eigenschaften auf lange Sicht zu enormen Einsparungen führen. Ein Beispiel sind die sogenannten Winglets oder Sharklets an Tragflächenenden, deren Entwicklung eine Reduktion des Kraftstoffverbrauchs von drei bis fünf Prozent zur Folge hatte [26].

Während der letzten Jahrzehnte konzentrierte sich die Entwicklung größtenteils auf subsonische Flugzeuge mit einer Reisegeschwindigkeit von ca. 85% der Schallgeschwindigkeit, d.h. einer Machzahl von  $Ma = 0.85$ . In den letzten Jahren rückten darüber hinaus auch Verkehrsflugzeuge höherer Machzahlen wieder stärker in den Fokus der Industrie [202]. Um den Luftwiderstand bei supersonischen Geschwindigkeiten trotz zusätzlicher Kompressibilitätseffekte gering zu halten, ist eine aktive oder passive Beeinflussung der Strömung sowie Formoptimierung notwendig [31], deren Entwicklung zunächst mit numerischen Methoden vorangebracht und schließlich im Windkanal finalisiert wird. Erst der Dreiklang aus fortschreitender Leistung moderner Rechnersysteme, steter Verbesserung numerischer Methoden und Nachfrage nach Flugzeugen dieser Art macht eine effiziente Entwicklung möglich. Dieses Beispiel zeigt exemplarisch, dass gleichermaßen genaue und effiziente Verfahren der numerischen Strömungsmechanik ein Schlüssel für die Entwicklung von Hochtechnologie sind. Die Weiterentwicklung der numerischen Methoden ist allerdings längst noch nicht abgeschlossen, denn oft sind Simulationen ungenau oder sie sind zu kostspielig [140]. Hinzu kommt, dass die numerischen Methoden laufend den technologischen Weiterentwicklungen angepasst werden müssen. Dazu gehören u.a. die zunehmende Verbreitung von Grafikprozessoren in Rechenclustern in Verbindung mit Verfahren

der künstlichen Intelligenz.

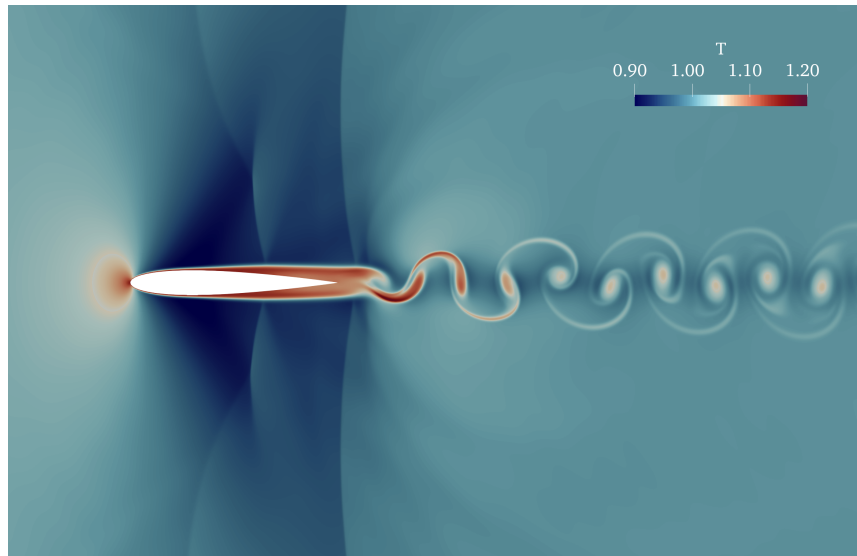
Konventionelle Ansätze der numerischen Strömungsmechanik diskretisieren die zugrundeliegenden Navier-Stokes-Gleichungen mithilfe von Finite-Differenzen- [133], Finite-Volumen- [49] oder Finite-Elemente-Methoden [12] und deren Varianten [214]. Während inkompressible Methoden angewandt auf Probleme im niedrigen Machzahlbereich weit entwickelt sind, bleibt die Simulation kompressibler Anwendungen problematisch [72]. Grund hierfür sind die bei trans- und supersonischen Strömungen auftretenden Effekte mit ihren besonderen Anforderungen an die Löser [142]. Dies beinhaltet intrinsische Effekte aufgrund starker Änderungen der Dichte, Temperatur, Viskosität und Wärmeleitfähigkeit in kompressiblen Strömungen. Insbesondere die Anströmung von Objekten erzeugt Stöße mit starken Gradienten der physikalischen Größen. Zur Stabilisierung des Algorithmus muss daher oft mit künstlicher numerischer Dissipation reagiert werden [214]. Je nach Ansatz verringert dieses Vorgehen jedoch die Qualität der Turbulenz im Nachlauf der Strömung [128].

Wie im inkompressiblen Fall gilt für die kompressible Turbulenz, dass das gesamte Spektrum an relevanten physikalischen Längen- und Zeitskalen idealerweise bis zum kleinsten Wirbel aufgelöst werden soll [72]. Diese direkte numerische Simulation (DNS) ist sehr teuer, weswegen im industriellen Umfeld bis heute meist statistische Methoden genutzt werden, basierend auf den gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (Reynolds-Averaged-Navier-Stokes – RANS) [141]. Jene Methoden sind durch die Mittelung der Größen effizient, allerdings sind sie aufgrund ihrer Approximationen ungenau. Deshalb sind Vorhersagen komplexer aerodynamischer Probleme, wie der Auftriebsbeiwert einer Tragfläche nahe des Strömungsabrisses, mit RANS kaum möglich [4]. Die steigende Rechnerleistung treibt daher Large-Eddy-Simulationen (LES) voran, die zumindest einen wesentlichen Teil der räumlichen und zeitlichen Fluktuationen explizit berechnen können [140].

Hinzu kommt, dass sich viele kompressible Strömungen durch eine permanente Interaktion von Stößen und Turbulenz auszeichnen [132]. Dies verdeutlicht Abb. 1.1, welche die Temperaturverteilung einer zweidimensionalen, transsonischen Anströmung eines NACA-0012-Tragflächenprofils darstellt. Zu erkennen sind Stöße entlang des Profils sowie Scherschichten und abstrahlende Akustik im Nachlauf. Ein moderner Löser muss daher in der Lage sein, gleichermaßen mit allen kompressiblen Effekten umgehen zu können. Nur wenige Löser sind dazu aktuell in der Lage [87].

Darüber hinaus sind zur genauen Vorhersage der Strömung häufig körperangepasste Gitter wünschenswert [52]. Allerdings offenbart ihre Verwendung in Kombination mit expliziten Zeitintegrationsverfahren einen weiteren Nachteil, denn die kleinste Zellgröße diktiert bei dieser Konfiguration die maximale Zeitschrittweite [119]. Dies führt zu sehr kleinen Zeitschrittweiten und langen Simulationslaufzeiten, insbesondere bei kompressiblen Lösern.

Alternativ zu den Methoden auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen existiert mit der Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) eine weitere Methode zur Strömungssimulation.



**Abbildung 1.1:** Temperatur einer transsonischen 2D-Anströmung eines NACA-0012-Profiles bei Machzahl  $Ma = 0.85$  und Reynoldszahl  $Re = 10000$ . Die Simulation wurde mit der in der dieser Arbeit entwickelten kompressiblen Semi-Lagrangeschen Lattice-Boltzmann-Methode durchgeführt.

In diesem Verfahren auf Basis der Boltzmann-Gleichung konnten für schwach kompressible Strömungen zuletzt viele Unzulänglichkeiten verglichen zu konventionellen Methoden beseitigt werden [127]. Den erfolgreichen Einsatz der LBM demonstrierten u.a. Falcucci et al. mit der Um- und Durchströmung eines Gießkannenschwamms [58]. Die Autoren wiesen dabei besondere Strömungseffekte im Nachlauf des Schwamms mit einer starken Parallelisierung von insgesamt 100 Milliarden Gitterpunkten nach. Der Einsatzbereich der LBM ist jedoch nicht auf akademische Probleme beschränkt und eine Reihe von weiteren Einsatzbereichen findet sich bspw. in Krause et al. [118]. Löhner sieht die LBM aufgrund ihrer Effizienz als einen möglichen Kandidaten für industrielle LES, d.h. LES-Simulationen, die „über Nacht“ durchgeführt werden können [140].

Trotz dieser Erfolge der Methode existiert jedoch ein Feld der LBM mit wenig Fortschritt und vielen Problemen: Trans- und supersonische, kompressible Strömungen [127]. Dies mag verwundern, schließlich ist die Boltzmann-Gleichung in besonderem Maße geeignet, um super-, hypersonische sowie verdünnte Strömungen zu beschreiben. Allerdings sind Methoden der Boltzmann-Gleichung generell viel teurer als Methoden zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichung. Einzig die LBM ist in Bezug auf die Kosten eine nennenswerte Ausnahme. Warum kann also die LBM nicht auch effizient für kompressible Strömungen eingesetzt werden?

Bisherige Methoden weisen Probleme in Bezug auf Stabilität, Effizienz und Genauigkeit bei supersonischen, kompressiblen Strömungen auf [67]. Eine Erläuterung der LBM-Gleichung mit den diskreten Verteilungsfunktionen  $f_i(\mathbf{x}, t)$  am Ort  $\mathbf{x}$  zur Zeit  $t$

hilft, die Problematik zu verdeutlichen,

$$f_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)), \quad (1.1)$$

wobei  $\delta_t$  die Zeitschrittweite,  $\boldsymbol{\xi}_i$  die diskreten Geschwindigkeiten und  $\Omega_i$  den Kollisionsoperator bezeichnet. Meist wird die mesoskopische Dynamik in Gl. (1.1) in zwei Schritten durchgeführt: Kollisions- und Strömungsschritt. Der Kollisionsschritt mit dem Kollisionsoperator  $\Omega_i$  modelliert die Interaktion der Verteilungsfunktionen und ist der physikalische Kern der Simulation. Der Strömungsschritt propagiert dagegen die Verteilungsfunktionen entlang der Charakteristiken  $\boldsymbol{\xi}$ . Der Wert der Verteilungsfunktionen bleibt dabei unverändert, weshalb der Strömungsschritt als exakt gilt. Gleichzeitig ist er aus algorithmischer Sicht durch das Verschieben der Werte sehr leicht und kostengünstig umzusetzen. Methoden mit exaktem Strömungsschritt werden in dieser Arbeit *On-Lattice-Boltzmann-Methoden* genannt, um die Advektion von Knoten zu Knoten zu unterstreichen.

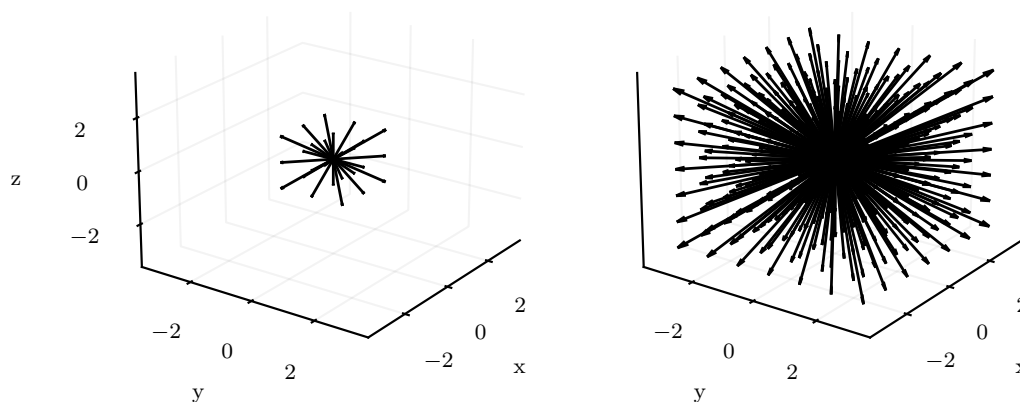
Die Anzahl diskreter Geschwindigkeiten  $Q$  beeinflusst grundlegend die Genauigkeit des LBM-Schemas. Im dreidimensionalen, schwach kompressiblen Fall bei niedrigen Machzahlen werden in einem Geschwindigkeitssatz meist  $Q = 27$  diskrete Geschwindigkeiten mit niedrigen Beträgen verwendet. Eine Darstellung findet links sich in Abb. 1.2. Die Strömungsgeschwindigkeit kann allerdings nicht größer sein als die schnellste Partikelgeschwindigkeit. Außerdem werden zur Modellierung der Temperatur sowohl langsame als auch schnelle diskrete Geschwindigkeiten benötigt, was bei  $Q = 27$  ebenso nicht gegeben ist.

Sollen On-Lattice-Boltzmann-Methoden für kompressible Simulationen verwendet werden, dann bedarf es dagegen extrem großer Geschwindigkeitssätze. Dieser Aspekt wurde beispielsweise durch die Arbeit von Frapolli et al. [66] deutlich, dessen Vorschlag einer kompressiblen On-Lattice-Boltzmann-Methode einen extrem großen Geschwindigkeitssatz mit  $Q = 343$  diskreten Geschwindigkeiten beinhaltet. Dieser ist rechts in Abb. 1.2 dargestellt. Ein Nachteil der Methode von Frapolli et al. war außerdem die nicht veränderliche Zeitschrittweite, was sich negativ auf die Stabilität des Verfahrens auswirkt. Alternativ zu On-Lattice-Boltzmann-Methoden wurden in der Vergangenheit auch die bekannten Finite-Volumen- oder Finite Differenzen-Methoden auf die LBM angewendet, welche prinzipiell stabiler sind, deren Algorithmen allerdings komplexer und rechenintensiver sind. Vorteilhaft ist jedoch, dass die Geschwindigkeitssätze viel flexibler gewählt werden können, also Einsparungen möglich sind, da die Rechenzeit linear mit  $Q$  skaliert. Diese Methoden werden fortan *Off-Lattice-Boltzmann-Methoden* genannt.

Eine zielführende Innovation wäre also ein LBM-Algorithmus für kompressible Strömungen, der die Vorzüge der genannten Ansätze bestmöglich vereint und zu einem kompakten, aber leistungsfähigen Schema führt. Dieser Gedankengang motiviert somit die vorliegende Arbeit.

Die Suche nach geeigneten Algorithmen führt zu den interpolationsbasierten LBM.





**Abbildung 1.2:** Größenvergleich des Geschwindigkeitssatzes mit  $Q = 27$  der regulären LBM für schwach kompressible Strömungen (links) mit dem Geschwindigkeitssatz mit  $Q = 343$  für kompressible Simulationen von Frapoli et al. [67] (rechts).

Dieser Ansatz ähnelt aus algorithmischer Sicht den On-Lattice-Boltzmann-Methoden, allerdings ist die Diskretisierung von Raum, Zeit und Geschwindigkeitsraum durch eine Interpolation der Verteilungsfunktionen im Strömungsschritt nicht so gravierend eingeschränkt. Damit übernimmt der Ansatz positive Aspekte anderer Off-Lattice-Boltzmann-Methoden. In einer vorhergegangenen Arbeit am Lehrstuhl für Strömungsmechanik wurde als Neukonzeption der interpolationsbasierten LBM die Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode (SLLBM) eingeführt [113]. Die SLLBM wurde in ihrer Ursprungsform für die Simulation schwach kompressibler Strömungen auf unstrukturierten Gittern konzipiert. Die SLLBM teilt die Simulationsgebiete in Zellen mit Stützstellen auf. Von den Stützstellen aus wird den Charakteristiken rückwärts in der Zeit gefolgt und die Verteilungsfunktionen am so gefundenen Punkt interpoliert. Durch Ansatzfunktionen hoher Ordnung kann die räumliche Konvergenzordnung der SLLBM erhöht werden. Außerdem ist die Zeitschrittweite bei der SLLBM nun veränderlich und die Kosten sind gegenüber anderen Off-Lattice-Boltzmann-Methoden erheblich reduziert [116].

Aufgrund dieser vielversprechenden Eigenschaften wurde der Versuch unternommen, eine SLLBM für kompressible Strömungen zu entwickeln. Hierbei stellten sich zu Beginn drei wesentliche Fragen, welche in dieser Dissertation beantwortet werden:

- i) Wie kann die SLLBM zur Simulation kompressibler Strömungen erweitert werden?
- ii) Können effiziente, zwei- und dreidimensionale Geschwindigkeitssätze für die SLLBM zur Simulation kompressibler Strömungen gefunden werden?

iii) Wie leistungsfähig ist das neu entwickelte Verfahren?

## Beitrag zum wissenschaftlichen Diskurs

Die Bearbeitung der o.g. Forschungsfragen brachte einen großen Erkenntnisgewinn, sodass als Erstautor insgesamt vier Artikel in wissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht wurden, deren Inhalt nun kurz erläutert wird. Darüber hinaus sind weitere Artikel als Mitautor verfasst worden, die in der Publikationsliste am Ende der Arbeit aufgeführt sind.

Der erste Artikel [Wilde et al., *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 90(3), 156–169 (2019)] betrachtet die zeitliche Diskretisierung der LBM und entstand aus den Vorarbeiten zur eigentlichen Arbeit. Hier wird die zeitliche Diskretisierung der LBM mit impliziten Mehrschrittverfahren detailliert untersucht. Es wird gezeigt, dass sich die zeitliche Fehlerordnung der LBM durch Adams-Moulton-Schema dritter Ordnung verbessern lässt, allerdings nur wenn eine Einschränkung des Stabilitätsbereichs in Kauf genommen wird. Andererseits zeigt der Artikel, dass Backward-Differentiation-Formulas (BDF) zweiter Ordnung die Stabilität der LBM steigern, was jedoch zu Lasten der Genauigkeit der LBM geschieht.

Die eigentliche Neuentwicklung einer kompressiblen Semi-Lagrangeschen Lattice-Boltzmann-Methode als Kern der Arbeit wurde im zweiten Artikel [Wilde et al., *Phys. Rev. E*, 101(5), 053306 (2020)] veröffentlicht. Der Artikel beschreibt zum einen ausführlich die Theorie der kompressiblen Off-Lattice-Boltzmann-Methode auf Basis der SLLBM. Zum anderen werden zur Validierung der Methode zahlreiche Testfälle ausgewertet und mit der Literatur verglichen, darunter eine Stoß-Wirbel-Interaktion mit gestauchten Gittern. Die Validierung bleibt jedoch zunächst auf zwei Dimensionen beschränkt.

Eine Auswertung der bisherigen Ansätze kompressibler LBM ergab, dass die Vielzahl der Modelle nicht auf dreidimensionale Strömungen erweitert wurden. Auch wenn oft nicht explizit genannt, lässt sich dies meist auf die hohen numerischen Kosten im 3D-Fall zurückzuführen. Als Lösung dieses Problems stellt sich für die kompressible SLLBM die effiziente Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums mit Kubaturregeln heraus. Dieser Ansatz offenbart innovative Geschwindigkeitssätze für alle bisherigen Off-Lattice-Boltzmann-Verfahren inklusive der SLLBM. Die Erkenntnisse wurden im dritten Artikel [Wilde et al., *J. Comput. Sci*, 51, 101355 (2021)] publiziert.

Zuletzt wurde mit der Methode der kompressible, dreidimensionale Taylor-Green-Wirbel erstmals mit einer LBM eingehend untersucht und mit kürzlich zuvor erschienener Literatur verglichen. Dieser Testfall zeichnet sich durch starke Stöße zu Beginn der Simulation aus, während zum Ende turbulente Effekte vorherrschen. Die Ergebnisse wurden im vierten Artikel [Wilde et al., *Phys. Rev. E*, 104(2), 1–15 (2021)] veröffentlicht, in dem auch die großen Zeitschrittweiten der Methode im Vergleich zu

konventionellen Lösern herausgearbeitet wurden.

Es ist somit im Verlauf der Promotion ein gleichermaßen genauer wie effizienter Löser der Boltzmann-Gleichung entstanden, der fundamentale Probleme bisheriger Ansätze löst. Die kompressible SLLBM kann dreidimensionale, supersonische, reibungsbehaftete Probleme der Strömungsmechanik sowohl auf strukturierten als auch körperangepassten Gittern simulieren. Die Methode kommt dabei in vielen Fällen ohne zusätzliche numerische, modellierte Dissipation aus, wie sie bei konventionellen Methoden notwendig ist.

Die vorliegende Dissertation spannt den Bogen über die bisherigen vier Artikel, fasst die Erkenntnisse der Artikel neu zusammen und vertieft einzelne Aspekte. Außerdem beinhaltet die Dissertation bislang unveröffentlichte Weiterentwicklungen der Methode. Dies beinhaltet die Anströmung eines NACA-0012 Tragflächenprofils, die dreidimensionale Anströmung einer Kugel mit körperangepassten Gittern sowie eine supersonische Kanalströmung.

## Aufbau der Arbeit

Dieser Einleitung folgt zunächst ein Grundlagenkapitel zur LBM. Hierzu wird die Herleitung aus der allgemeineren Boltzmann-Gleichung ebenso erläutert wie die Diskretisierungen, die schlussendlich zur Lattice-Boltzmann-Gleichung führen. Auszugsweise werden außerdem verschiedene Aspekte der LBM wie alternative Kollisionsmodelle oder Zeitintegrationsverfahren diskutiert. Kapitel 3 beschreibt den Stand der Technik existierender CFD-Verfahren sowie den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Ansatz zur Erweiterung der SLLBM für kompressible Strömungen.

Die Geschwindigkeitsdiskretisierung besitzt eine zentrale Bedeutung sowohl für die SLLBM als auch für weitere Methoden der Boltzmann-Gleichung. Daher wird der numerischen Quadratur als Mittel zur Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung ein Kapitel gewidmet. Hierzu wird der Weg aufgezeigt, wie neue Geschwindigkeitssätze für die SLLBM gefunden werden können, die eine Reduktion der Rechenzeit bei vergleichbarer Genauigkeit erlauben. Der Schlüssel hierzu ist das Forschungsfeld der Kubaturen, d.h. der multivariaten Quadraturen. Die gefundenen Geschwindigkeitssätze werden im Anschluss in Bezug auf Genauigkeit und Effizienz diskutiert. Zuletzt wird gezeigt, wie sich die Geschwindigkeitsdiskretisierung der LBM und SLLBM von anderen diskreten Methoden auf Basis der Boltzmann-Gleichung unterscheidet.

In Kapitel 5 wird die Methode validiert, Simulationsergebnisse werden ausgewertet und diese mit der Literatur verglichen. Es folgen eine Zusammenfassung der Arbeit sowie eine Diskussion der Ergebnisse mit Fazit der Arbeit.

## Anmerkung zur Notation

Während Operationen über die Raumrichtungsindizes mit griechischen Lettern wie  $\alpha, \beta$  usw. grundsätzlich mittels Einsteinscher Summenkonvention erfolgen, so ist dies für die Indizes der diskreten Geschwindigkeiten  $i$  nicht der Fall.

Im Folgenden meint

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}, \quad (1.2)$$

sowie

$$\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}. \quad (1.3)$$

# 2 Die Lattice-Boltzmann-Methode

---

*“Lettuce is like conversation: it must be fresh and crisp, so sparkling that you scarcely notice the bitter in it.”*

– Charles Dudley Warner

Die Lattice-Boltzmann-Methode (LBM) ist ein numerisches Verfahren zur Strömungssimulation. Anstelle der direkten Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen basiert die Lattice-Boltzmann-Methode auf der Diskretisierung der kollisionsvereinfachten Boltzmann-Gleichung. Letztere beschreibt die Dynamik einer Verteilungsfunktion der Geschwindigkeiten von Partikeln. Aus den statistischen Momenten der Verteilungen können die makroskopischen Größen Dichte, Geschwindigkeit und Energie geschlossen werden.

Die Boltzmann-Gleichung ist der Ausgangspunkt der LBM und wird im Folgenden erläutert, gefolgt von den Diskretisierungsschritten und Vereinfachungen, die schlussendlich zur Formulierung der LBM führen. Der Fehlerbetrachtung der LBM in Abschnitt 2.5 folgt ein Blick auf Erweiterungen der LBM in Bezug auf die Zeitintegration mittels Mehrschrittverfahren und in Bezug auf die Kollisionsoperatoren.

## 2.1 Navier-Stokes-Gleichungen

Die zeitliche Entwicklung von Dichte  $\rho$ , Impuls  $\rho u_\alpha$  und totaler Energie  $E$  eines Fluids wird durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \tag{2.1}$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = \partial_\beta (\sigma_{\alpha\beta}) + \rho F_\alpha, \tag{2.2}$$

$$\partial_t (\rho E) + \partial_\beta (\rho E u_\beta) = -\partial_\beta (\kappa \partial_\beta T) + \partial_\beta (u_\gamma \sigma_{\beta\gamma}), \tag{2.3}$$

wobei  $P$  den Druck,  $\boldsymbol{\sigma}$  den Spannungstensor,  $\mathbf{F}$  eine volumenbezogene externe Kraft,  $\kappa$  die Wärmeleitfähigkeit und  $T$  die Temperatur bezeichnen.

Der Spannungstensor  $\sigma$  ist durch

$$\sigma_{\alpha\beta} = -P\delta_{\alpha\beta} + \mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) - \mu_b \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \quad (2.4)$$

definiert, in Abhängigkeit der dynamischen Scherviskosität  $\mu$  und der Volumenviskosität  $\mu_b$ .

Aufgrund der Einbeziehung der Energiegleichung mit Wärmeleitung werden die oben genannten Gleichungen auch Navier-Stokes-Fourier-Gleichungen genannt, um die Beziehung zur Wärmeleitungsgleichung  $\partial_t T = \hat{a} \partial_\alpha \partial_\alpha T$  zu betonen. Hierbei bezeichnet  $\hat{a}$  die Temperaturleitfähigkeit  $\hat{a} = \kappa / (C_p \rho)$ , die sich durch Division der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$  durch die Wärmekapazität bei konstantem Druck  $C_p$  und der Dichte  $\rho$  ergibt. Die Mehrzahl der numerischen Verfahren der Strömungsmechanik lösen die Navier-Stokes-Gleichungen unmittelbar; dagegen lösen Verfahren auf Basis der Boltzmann-Gleichung die Navier-Stokes-Gleichungen nur mittelbar, d.h. der Zusammenhang zwischen beiden Gleichungen muss mit geeigneten Techniken gezeigt werden. Hierzu zählt die Chapman-Enskog-Entwicklung, auf die im Laufe des folgenden Abschnitts eingegangen wird.

## 2.2 Boltzmann-Gleichung und Diskretisierung

Als Ausgangspunkt der weiteren Überlegungen dient eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$ , welche die Wahrscheinlichkeit angibt, ein Teilchen an Ort  $\mathbf{x}$  zur Zeit  $t$  mit der Partikelgeschwindigkeit  $\boldsymbol{\xi}$  anzutreffen. Die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} + \frac{F_\alpha}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\alpha} = \Omega(f) \quad (2.5)$$

beschreibt die Dynamik der Verteilungsfunktion  $f$ . Der Kollisionsoperator  $\Omega(f)$  formuliert hierbei die Interaktion der Partikel untereinander. Die dichtebezogene Kraft  $\mathbf{F}/\rho$  wird für die folgenden Betrachtungen außen vor gelassen.

Boltzmann formulierte für  $\Omega(f)$  den *Stoßzahlansatz*, der die Interaktion der Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$  mit einer weiteren Verteilungsfunktion  $f_1(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}_1)$  modelliert, d.h.

$$\Omega(f) = \int_{\xi_1} \int_{A_c} (f' f'_1 - f f_1) (\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}) dA_c d\xi_1. \quad (2.6)$$

Hierbei bezeichnet  $dA_c$  den differentiellen Wirkungsquerschnitt und  $f'$  sowie  $f'_1$  stehen für die Teilchenverteilungen nach der Kollision. Der Stoßzahlansatz geht also von binären Kollisionen unter der Annahme des molekularen Chaos aus und gilt somit für Gase, nicht jedoch für Flüssigkeiten [198]. Trotz dieser Vereinfachung der binären Kollisionen ist der Ansatz immer noch so komplex, dass er für Simulationen kaum lösbar ist [198].

Im Gegensatz zum Stoßzahlansatz vereinfacht das Kollisionsmodell nach Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) [14] die Boltzmann-Gleichung substanziell. Bei diesem Modell wird ein exponentiell abklingendes Streben der Verteilungsfunktion zum Gleichgewicht  $f^{\text{eq}}$  mit der Relaxationszeit  $\lambda$  angenommen, d.h.

$$\Omega_{\text{BGK}}(f) = -\frac{1}{\lambda}(f - f^{\text{eq}}). \quad (2.7)$$

Als Gleichgewichtsverteilung  $f^{\text{eq}}$  in Gl. (2.7) dient die Maxwell-Boltzmann-Verteilung, welche selbst eine Lösung der Boltzmann-Gleichung im Gleichgewicht ist [88]

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left[-\frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right], \quad (2.8)$$

mit spezifischer Gaskonstante  $R$  und Temperatur  $T$ .

Einige ausgewählte statistische Momente der Boltzmann-Gleichung entsprechen dabei den makroskopischen Größen der Dichte  $\rho$ , des Impulses  $\rho\mathbf{u}$  und der Energie  $E$

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{\mathbb{R}^3} f d\boldsymbol{\xi}, \\ \rho\mathbf{u} &= \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{\xi} f d\boldsymbol{\xi}, \\ 2\rho E &= \int_{\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{\xi}|^2 f d\boldsymbol{\xi} = \rho|\mathbf{u}|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2 f d\boldsymbol{\xi}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Neben diesen Erhaltungsgrößen können der Spannungstensor  $\Pi$  zweiter Ordnung und der Wärmeflusstensor  $\mathcal{Q}$  dritter Ordnung

$$\Pi = \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{\xi}^2 f d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.10)$$

$$\mathcal{Q} = \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{\xi}^3 f d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.11)$$

aus  $f$  berechnet werden. Ohne unmittelbare physikalische Interpretation zu verstehen sind dagegen die darüber hinaus ableitbaren Momente wie z.B. der Fluss des Wärmeflusstensors vierter Ordnung

$$\mathcal{R} = \int_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{\xi}^4 f d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.12)$$

wobei diese Hierarchie höherer Momente beliebig fortgesetzt werden kann. In Anlehnung an den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik formulierte Boltzmann das H-Theorem, welches fordert, dass für die H-Funktion [88]

$$H(f) = \int_{\mathbb{R}^3} f \ln f d\boldsymbol{\xi} \quad (2.13)$$

die Bedingungen

$$H \leq 0 \quad \text{sowie} \quad \frac{\partial H}{\partial t} \leq 0 \quad (2.14)$$

erfüllt sind, d.h.  $H$  kann im zeitlichen Verlauf lediglich abnehmen.

Die Gültigkeit der Boltzmann-Gleichung ist insofern beschränkt, dass sie von einatomigen Gasen ausgeht [88]. Dies wirkt sich auf die Bestimmung des Isentropenexponenten  $\gamma$  aus, der als das Verhältnis der Wärmekapazitäten mit konstantem Druck und konstantem Volumen  $\gamma = C_p/C_v$  definiert ist, denn aufgrund der Annahme einatomiger Gase ist der Isentropenexponent mit  $\gamma = (1+2/D)$  von vornherein festgelegt, wobei  $D$  die Anzahl der räumlichen Dimension beschreibt. Gase mit mehratomigen Molekülen, wie z.B. Sauerstoff, weisen neben den translatorischen Freiheitsgraden jedoch auch Freiheitsgrade für Vibration und Rotation der Moleküle auf. In diesem Fall gelten abweichende Isentropenexponenten, welche jedoch von der Boltzmann-Gleichung in ihrer Ursprungsform nicht modelliert werden.

Eine ähnliche Einschränkung gilt bei Verwendung des BGK-Kollisionsoperators für die Prandtlzahl, welche als Verhältnis von kinematischer Viskosität und Temperaturleitfähigkeit  $\text{Pr} = \nu/\hat{\alpha}$  definiert ist. Durch die BGK-Gleichung (2.7) werden alle Momente in gleichem Maße relaxiert, also auch der Wärmeflussensor  $\mathcal{Q}$ . Hierdurch ist die Prandtlzahl auf  $\text{Pr}_{\text{BGK}} = 1$  fixiert [25]. Vorschläge zur Modellierung variabler Isentropenexponenten und Prandtlzahlen werden in Kapitel 3 aufgeführt.

Die Boltzmann-Gleichung überragt den Gültigkeitsbereich der Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen insofern, dass auch Strömungen außerhalb des Kontinuums erfasst werden. Kontinuum bedeutet, dass ein Raum gleichmäßig mit dem jeweiligen Medium gefüllt ist [88]. Die Knudsenzahl

$$\text{Kn} = \frac{l_f}{L}, \quad (2.15)$$

bemisst den Gaszustand aus gaskinetischer Sicht und wird durch das Verhältnis aus der mittleren freien Weglänge eines Moleküls in Verhältnis zu einer charakteristischen Länge  $L$  ausgedrückt. Kontinuumsströmungen setzen voraus, dass die mittlere freie Weglänge viel kleiner als die charakteristische Länge  $L$  ist, d.h.  $\text{Kn} \ll 1$ , während stark verdünnte Gase Knudsenzahlen von  $\text{Kn} \geq 1$  aufweisen. Die Knudsenzahl kann ebenso durch das Verhältnis aus Machzahl und Reynoldszahl ermittelt werden [88]

$$\text{Kn} \approx \sqrt{\gamma} \frac{\text{Ma}}{\text{Re}}. \quad (2.16)$$

Beispiele technischer Probleme mit verdünnten Strömungen sind Mikroströmungen mit sehr kleiner charakteristischer Länge oder der Eintritt von Raumfahrzeugen in die Erdatmosphäre als ein Kerngebiet der Aerothermodynamik [98].



## Chapman-Enskog-Entwicklung und Gradsches System der 13 Momente

Die Überführung der Boltzmann-Gleichung in die makroskopischen Erhaltungsgleichungen wie die Euler- oder Navier-Stokes-Fourier-Gleichungen ist ein zentraler Aspekt der kinetischen Gastheorie. Ein bekanntes Hilfsmittel ist die Chapman-Enskog-Entwicklung, mit der die Boltzmann-Gleichung in die makroskopische Erhaltungsgleichungen überführt werden [27]. Dazu wird die Verteilungsfunktion durch einen Parameter  $\epsilon$  entwickelt, der oft als Knudsenzahl  $\epsilon = \mathcal{O}(\text{Kn})$  identifiziert wird [195]

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots + \epsilon^k f^{(k)}. \quad (2.17)$$

Bei kleinen Knudsenzahlen, d.h. kontinuierlichen Strömungen, sind die quadratischen und höheren Terme praktisch vernachlässigbar [88]. Dabei werden für verschiedene Ordnungen in der Entwicklung in Gl. (2.17) unterschiedliche Stufen der Erhaltungsgleichungen ermittelt. Durch die Entwicklung kann gezeigt werden, dass die Boltzmann- und die BGK-Boltzmann-Gleichung im Gleichgewicht die Euler-Gleichungen approximieren. Für kleine Abweichungen vom Gleichgewicht werden darüber hinaus die Navier-Stokes-Gleichungen approximiert. Allerdings ist die Entwicklung nicht auf diese niedrige Expansionsordnung beschränkt und höhere Entwicklungsstufen führen zu den Burnett- und Super-Burnett-Gleichungen [17]. Die Motivation für Entwicklungen höherer Ordnung besteht darin, weitere makroskopische Erhaltungsgleichungen zu finden, die zur Lösung verdünnter Strömungen eingesetzt werden können [198], ohne dass die Boltzmann-Gleichung hierzu direkt gelöst werden muss. Konkret bedeutet dies, dass neben den konservativen Größen der Dichte, des Impulses und der Energie, auch die Dynamik des Spannungstensors und des Wärmeleitungstensors mit eigenständigen Erhaltungsgleichungen gelöst wird. Es zeigte sich jedoch, dass die Burnett-Gleichungen instabil und Randbedingungen schwierig zu formulieren sind [17]. Die verschiedenen Stufen in Abhängigkeit des Expansionsgrads  $k$  sind folgend nochmals zusammengefasst:

- $k = 0$ : Euler-Gleichungen
- $k = 1$ : Navier-Stokes-Gleichungen
- $k = 2$ : Burnett-Gleichungen
- $k = 3$ : Super-Burnett-Gleichungen

Ein alternatives Vorgehen zur Chapman-Enskog-Entwicklung schlug Harold Grad vor [78], indem er die Boltzmann-Gleichung auf eine Hermite-Basis projizierte. Hierdurch berechnen sich die Momente  $\mathbf{a}^{(n)}$   $n$ -ter Ordnung als

$$\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.18)$$

wobei  $\mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi})$  die Hermite-Polynome n-ter Ordnung bezeichnet, auf die in Abschnitt 2.3.1 eingegangen wird. Ähnlich zu den Burnett-Gleichungen werden durch diesen Ansatz nicht nur die makroskopischen Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie mit Hermite-Polynomen niedriger Ordnung formuliert, sondern auch Gleichungen für die zeitliche Entwicklung des Spannungstensors und des Wärmeflussensors. Hierdurch ergeben sich in drei Dimensionen dreizehn Erhaltungsgleichungen (G13), statt der üblichen fünf Navier-Stokes-Erhaltungsgleichungen. Mittels einer regularisierten Form dieser 13 Gleichungen (R13) konnten Torrilhon und Struchtrup zeigen, dass dieser Ansatz geeignet ist, um die physikalischen Effekte bis zur o.g. Super-Burnett-Ebene zu beschreiben [205].

Die Projektion der Boltzmann-Gleichung auf eine Hermite-Basis ist bei der polynomiellen Entwicklung der Gleichgewichtsfunktion  $f^{\text{eq}}$  von zentraler Bedeutung für die Herleitung der LBM [181, 182]. Hierauf wird in Abschnitt 2.3.2 eingegangen.

## Direct-Simulation-Monte-Carlo (DSMC)

Ein weiteres relevantes Verfahren auf Basis der Boltzmann-Gleichung zur Berechnung von Strömungen außerhalb des Kontinuumsbereichs ist die Direct-Simulation-Monte-Carlo-Methode (DSMC) [15], u.a. mit Anwendungen zur Berechnung des zuvor erwähnten Atmosphäreneintritts [151]. Anders als andere Methoden auf Basis der Boltzmann-Gleichung operiert die DSMC mit Teilchen, wobei jedes einzelne Teilchen eine Vielzahl von Molekülen in der Größenordnung  $\mathcal{O}(10^{17})$  repräsentiert [108].

Das Simulationsgebiet wird zunächst in Zellen aufgeteilt, in denen Kollisionen gemäß der Boltzmann-Gleichung stattfinden können, im Wechsel mit einer Freiflugphase der Teilchen ohne Kollision. Die DSMC unterscheidet sich allerdings grundlegend von Simulationen der Moleküldynamik. Bei letzterer werden die Kräfte zwischen den im näheren Umfeld befindlichen Teilchen meist mittels Lennard-Jones-Potential ermittelt, woraufhin die Teilchen den Newtonschen Bewegungsgleichungen folgen [146]. Dagegen basiert die DSMC auf einer statistischen Mittelung, bei dem ausschließlich paarweise Kollisionen zufälliger Teilchen innerhalb einer Zelle unabhängig des tatsächlichen Aufenthaltsorts durchgeführt werden [146].

Die DSMC zeichnet sich gegenüber anderen statistischen Methoden durch eine uneingeschränkte Stabilität des Algorithmus aus, ein Nachteil ist dagegen der hohe Rechenaufwand für Kontinuumsströmungen mit kleinen Knudsenzahlen [164]. Dies offenbart sich in einem vielbeachteten, kürzlich erschienenen Artikel zur Simulation von Turbulenz im Kontinuumsbereich mit der DSMC [70]. Für die Simulation des dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbels bei Reynoldszahl  $Re = 450$  waren insgesamt

240 Milliarden Teilchen notwendig und die Rechenzeit betrug 500 Stunden mit einer halben Million CPU-Kernen. Eine vergleichbar akkurate Simulation mit der LBM dagegen benötigt dagegen höchstens einige Minuten auf einer aktuellen, handelsüblichen Grafikkarte mit mindestens gleichwertigen Ergebnissen. Während die DSMC für stark verdünnte Strömungen mit hohen Knudsenzahlen ein etabliertes Verfahren ist, werden partikelbasierte Methoden daher auf absehbare Zeit nur eine untergeordnete Rolle für Simulationen im Kontinuumsbereich spielen.

## Discrete-Velocity-Method

Ähnlich wie die DSMC ist die Discrete-Velocity-Method (DVM) ein weiteres Verfahren zur Berechnung verdünnter Gase auf Basis der Boltzmann-Gleichung [148]. Entgegen der partikelbasierten DSMC ist die DVM aufgrund der Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums eng mit der LBM verwandt [7], allerdings ist die Weiterentwicklung beider Methoden bisher weitgehend unabhängig voneinander vorangeschritten. Die DVM nutzt meist Finite-Volumen- oder Finite-Differenzen-Methoden zur Diskretisierung des Raums und zeichnet sich durch eine große Anzahl diskreter Geschwindigkeiten aus. Für schwach kompressible Probleme mit niedrigen Machzahlen im Kontinuumsbereich ist die LBM den DVM überlegen, da die LBM mit einer minimalen Anzahl an diskreten Geschwindigkeiten und einem exaktem Strömungsschritt entlang der Charakteristiken operiert. Dagegen diskretisiert die DVM den gesamten Geschwindigkeitsraum mit summierten Quadraturformeln und somit mit einer großen Anzahl an Stützstellen, um die Effekte verdünnter Gase zu erfassen. Li et al. simulierten bspw. den atmosphärischen Wiedereintritt mit der DVM [136]. Aufgrund der Verwandtschaft der DVM mit der LBM, werden die Geschwindigkeitsdiskretisierungen beider Methoden in Abschnitt 4.3 weiterführend diskutiert.

## 2.3 Grundlagen der Lattice-Boltzmann-Methode

Nach diesem einleitenden Überblick über die Methoden auf Basis der Boltzmann-Gleichung, widmet sich der folgende Abschnitt den grundlegenden Diskretisierungsschritten der Boltzmann-Gleichung zur LBM. Dazu wird, ausgehend von der BGK-Boltzmann-Gleichung aus Gl. (2.5) in Verbindung mit Gl. (2.7), nun die Lattice-Boltzmann-Gleichung hergeleitet. Die Diskretisierung der LBM ist, im Vergleich zu anderen Verfahren auf Basis der Boltzmann-Gleichung, durch drei wesentliche Aspekte geprägt:

- i) Projektion der Geschwindigkeitsverteilung und der Gleichgewichtsverteilung auf eine Hermite-Basis,
- ii) Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums mittels Gauß-Hermite-Quadratur, sowie

- iii) zeitliche Integration der Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen entlang der Charakteristiken mit der Trapezregel.

Auch für das kompressible Modell dieser Arbeit sind die genannten drei Aspekte ein wesentlicher Bestandteil. Daher werden sie in den folgenden Abschnitten einzeln erläutert.

### 2.3.1 Projektion der Verteilungen auf eine Hermite-Basis

Im ersten Schritt wird die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  mithilfe multivariater Hermite-Polynome  $\mathcal{H}^{(n)}$  der Ordnung  $n$  ausgedrückt.

Die multivariaten Hermite-Polynome werden dabei als

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\xi}) = (-1)^n \frac{1}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla^{(n)} \omega(\boldsymbol{\xi}) \quad (2.19)$$

definiert, unter Berücksichtigung der Gewichtsfunktion

$$\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-|\boldsymbol{\xi}|^2/2}. \quad (2.20)$$

Der multivariate Nabla-Operator  $\nabla^{(n)}$  ist eine Kurzform der Schreibweise

$$\nabla^{(n)} = \nabla_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\alpha_n}}. \quad (2.21)$$

Somit lauten die multivariaten Hermite-Polynome bis zur vierten Ordnung

$$\mathcal{H}_i^{(0)} = 1 \quad (2.22)$$

$$\mathcal{H}_{i\alpha}^{(1)} = \xi_{i\alpha} \quad (2.23)$$

$$\mathcal{H}_{i\alpha\beta}^{(2)} = \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} \quad (2.24)$$

$$\mathcal{H}_{i\alpha\beta\gamma}^{(3)} = \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} - (\xi_{i\alpha} \delta_{\beta\gamma} + \xi_{i\beta} \delta_{\alpha\gamma} + \xi_{i\gamma} \delta_{\alpha\beta}) \quad (2.25)$$

$$\mathcal{H}_{i\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} - \mathcal{T}_i + (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \quad (2.26)$$

mit

$$\mathcal{T}_i = \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \delta_{\gamma\delta} + \xi_{i\alpha} \xi_{i\gamma} \delta_{\beta\delta} + \xi_{i\alpha} \xi_{i\delta} \delta_{\beta\gamma} + \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \delta_{\alpha\delta} + \xi_{i\beta} \xi_{i\delta} \delta_{\alpha\gamma} + \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \delta_{\alpha\beta}.$$

Die eindimensionalen Hermite-Polynome sind orthogonal bezogen auf das gewichtete Skalarprodukt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \mathcal{H}^{(m)}(\xi) \mathcal{H}^{(n)}(\xi) d\xi = n! c_s \delta_{mn}, \quad (2.27)$$

wobei  $\delta$  das Kronecker-Delta und  $c_s$  eine Gitterkonstante bezeichnet. Die Orthogonalität gilt analog für die multivariaten Hermite-Polynome [121]. Außerdem lassen sich Hermite-Polynome unterschiedlicher Ordnung durch eine Rekursivitätsbeziehung ausdrücken

$$\mathcal{H}^{(n+1)}(\xi) = \xi \mathcal{H}^{(n)}(\xi) - n \mathcal{H}^{(n-1)}(\xi). \quad (2.28)$$

Die Geschwindigkeitsverteilungen  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  werden nun auf einen Hilbertraum projiziert, der durch Hermite-Polynome aufgespannt wird [78]. Durch die Projektion können die Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen exakt durch eine unendliche Reihe ausgedrückt werden

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) : \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}). \quad (2.29)$$

Der Doppelpunkt bezeichnet an dieser Stelle die vollständige Kontraktion der beiden  $n$ -stufigen Tensoren. Die Expansionskoeffizienten sind definiert als

$$\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.30)$$

sowie im Falle des Gleichgewichts

$$\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^D} f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.31)$$

Der Übersichtlichkeit halber wird im Folgenden die räumliche und zeitliche Abhängigkeit vorübergehend nicht notiert. Die nächsten Schritte machen sich zunutze, dass die Gewichtsfunktion in Gl. (2.20) eine ähnliche Form wie die Maxwell-Boltzmann-Verteilung in Gl. (2.8) aufweist. Dieser Umstand ermöglicht, dass die Maxwell-Boltzmann-Verteilung nun mit der Gewichtsfunktion (2.20) ausgedrückt wird, d.h.

$$f^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(RT)^{D/2}} \omega\left(\frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{RT}}\right). \quad (2.32)$$

Dieser Ausdruck wird dann in Gl. (2.31) anstelle  $f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  eingesetzt, um die Gleichgewichtskoeffizienten  $\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)}$  zu ermitteln

$$\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)} = \frac{\rho}{(RT)^{D/2}} \int_{\mathbb{R}^D} \omega\left(\frac{\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}}{\sqrt{RT}}\right) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.33)$$

Unter Zuhilfenahme von Integraltafeln oder numerischen Softwarepaketen wie *SymPy* [147] können die Expansionskoeffizienten des Gleichgewichts in Gl. (2.33) berechnet

werden, hier angegeben bis zur vierten Ordnung

$$a_{\text{eq}}^{(0)} = \rho \quad (2.34a)$$

$$a_{\alpha, \text{eq}}^{(1)} = \rho u_{\alpha} \quad (2.34b)$$

$$a_{\alpha\beta, \text{eq}}^{(2)} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} + c_s^2 (\theta - 1) \delta_{\alpha\beta}] \quad (2.34c)$$

$$a_{\alpha\beta\gamma, \text{eq}}^{(3)} = \rho [u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} + c_s^2 (\theta - 1) (\delta_{\alpha\beta} u_{\gamma} + \delta_{\alpha\gamma} u_{\beta} + \delta_{\beta\gamma} u_{\alpha})] \quad (2.34d)$$

$$a_{\alpha\beta\gamma\delta, \text{eq}}^{(4)} = \rho \{ u_{\alpha} u_{\beta} u_{\gamma} u_{\delta} + c_s^2 [\theta - 1] [c_s^2 (\theta - 1) (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) + \delta_{\alpha\beta} u_{\gamma} u_{\delta} + \delta_{\alpha\gamma} u_{\beta} u_{\delta} + \delta_{\alpha\delta} u_{\beta} u_{\gamma} + \delta_{\beta\gamma} u_{\alpha} u_{\delta} + \delta_{\beta\delta} u_{\alpha} u_{\gamma} + \delta_{\gamma\delta} u_{\alpha} u_{\beta}] \}. \quad (2.34e)$$

Die Expansionskoeffizienten in Gleichungen (2.34) sind dabei Linearkombinationen der Momente Dichte, Impuls und relativer Temperatur  $\theta = T/T_0$  bezogen auf die Referenztemperatur  $T_0$ . Für isothermale Simulationen mit  $\theta = 1$  fallen einige Terme in den Gleichungen (2.34) vereinfachend fort. Zudem können die Expansionskoeffizienten des Gleichgewichts als die Gleichgewichtsmomente in Gl. (2.10) identifiziert werden

$$\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(2)} = \mathbf{\Pi}_{\text{eq}}, \quad \mathbf{a}_{\text{eq}}^{(3)} = \mathbf{Q}^{\text{eq}}, \quad \text{sowie} \quad \mathbf{a}_{\text{eq}}^{(4)} = \mathbf{R}^{\text{eq}}. \quad (2.35)$$

Unklar bleibt zunächst die notwendige Expansionsordnung  $N$  der Reihe in Gl. (2.29). Die wegweisende Arbeit zu dieser Frage stammt von Shan [182], der durch Ausnutzen der Wiederholungsrelation der Hermite-Polynome in Gl. (2.28) die Expansionskoeffizienten rekursiv durch Gradienten und zeitliche Ableitungen derselbigen ausdrückte

$$\mathbf{a}_{k+1}^{(n)} = -\tau \left[ \sum_{m=0}^k \partial_t^{(k)} \mathbf{a}_{k-m}^{(n)} + n \nabla \mathbf{a}_k^{(n-1)} + \nabla \cdot \mathbf{a}_k^{(n+1)} \right], \quad (2.36)$$

wobei der Index  $k$  den Expansionsgrad der Chapman-Enskog-Entwicklung und  $\tau$  den Relaxationsparameter bezeichnet, der im nächsten Abschnitt erläutert wird. Aus Gl. (2.36) kann nun die notwendige Ordnung der Momente gefolgert werden, um ein jeweiliges Level der makroskopischen Größen wiederzugeben. Für isothermale Simulationen auf Ebene der Navier-Stokes-Gleichungen ( $k = 1$ ) ist die korrekte Darstellung des Spannungstensors notwendig. Der Spannungstensor ist ein Moment zweiter Ordnung, d.h.  $n = 2$ . Aus Gl. (2.36) wird ersichtlich, dass zur Berechnung von  $\mathbf{a}_{k=1}^{(n=2)}$  auch der Gradient von  $\mathbf{a}_{k=0}^{(n=3)}$  korrekt berechnet werden muss. Dies bedeutet, dass Gl. (2.29) erst bei  $N = 3$  abgebrochen werden darf, um den Spannungstensor korrekt darzustellen. Für thermale und kompressible Simulationen, die auf eine korrekte Berechnung des Wärmeflusses angewiesen sind, beträgt die Expansionsordnung entsprechend  $N = n + k = 3 + 1 = 4$ . Unter Berücksichtigung dieser Überlegungen wird somit die Gleichgewichtsfunktion formuliert

$$f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \approx \omega(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}, t) : \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \quad (2.37)$$

womit alle Momente der Maxwell-Boltzmann-Verteilung bis Ordnung  $N$  korrekt abgebildet werden, woraus folgt, dass der Abbruch der Reihe bei Ordnung  $N$  keinen Einfluss auf die Gleichgewichtsmomente der Ordnungen  $n \leq N$  hat. Die Projektion ist nun abgeschlossen, jedoch sind Geschwindigkeitsraum sowie räumliche und zeitliche Diskretisierung weiterhin kontinuierlich und werden in den folgenden beiden Abschnitten thematisiert.

### 2.3.2 Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums

Der kontinuierliche Geschwindigkeitsraum der Geschwindigkeitsverteilung  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  wird im Folgenden in eine diskrete Form  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_i, t)$  überführt. Dabei ist das vorrangige Ziel, die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten  $\boldsymbol{\xi}_i$  möglichst gering zu halten und dennoch alle für die Simulation notwendigen Momente hinreichend zu approximieren.

Für die LBM hat sich hierbei eine Gauß-Hermite-Quadratur etabliert, da diese einen hohen Grad der Quadratur  $\mathfrak{N}$  mit einer optimalen Anzahl an Stützstellen erreicht. Bei der Gauß-Hermite-Quadratur wird das Produkt einer Funktion  $\mathbb{F}$  und einer Gewichtsfunktion  $\hat{\omega} = e^{-\mathbf{x}^2}$  in den Grenzen  $-\infty$  bis  $\infty$  integriert, indem das Integral durch eine Summe gewichteter Funktionswerte an geeigneten Stützstellen ersetzt wird, also

$$I(\mathbb{F}) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(\mathbf{x}) \mathbb{F}(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=0}^n w_i \mathbb{F}(\mathbf{x}_i). \quad (2.38)$$

Im Falle der eindimensionalen Gauß-Hermite-Quadratur werden die Stützstellen als die  $n$  Nullstellen des Hermite-Polynomes  $n$ -ter Ordnung gewählt, womit Polynome des Grades  $2n - 1$  exakt integriert werden. Um die eindimensionalen Gauß-Quadraturen auf multivariate Integrationsregeln zu erweitern, sind verschiedene Wege denkbar, z.B. über die Gaußsche Produktregel, sowie über die sogenannte Kubatur. Beide Wege werden in Kapitel 4 näher untersucht.

Bei der Verwendung multivariater Quadraturen in der LBM, werden die Expansionskoeffizienten aus Gl. (2.30) durch eine gewichtete Summe ausgedrückt

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(n)} &= \int_{\mathbb{R}^D} \omega(\boldsymbol{\xi}) \frac{f}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \mathcal{H}^{(n)} d\boldsymbol{\xi} = \sum_{i=0}^{Q-1} \frac{w_i f(\boldsymbol{\xi}_i) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i)}{\omega(\boldsymbol{\xi}_i)} \\ &= \sum_{i=0}^{Q-1} f_i \mathcal{H}_i^{(n)}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Die kontinuierliche Verteilungsfunktion  $f$  wird dabei durch die diskrete Form  $f_i = w_i f(\boldsymbol{\xi}_i) / \omega(\boldsymbol{\xi}_i)$  ersetzt, womit die Gewichte  $w_i$  fortan in den diskreten Verteilungsfunktionen enthalten sind. Für die Hermite-Polynome gilt  $\mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i) = \mathcal{H}_i^{(n)}$  [181, 218]. Die Definition von  $\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)}$  lautet simultan zu Gl. (2.39)

$$\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\text{eq}} \mathcal{H}_i^{(n)}. \quad (2.40)$$

Die Momente der Dichte und des Impulses berechnen sich somit in der diskreten Version als

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\text{eq}} \quad \text{und} \quad \rho u_\alpha = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} f_i^{\text{eq}}. \quad (2.41)$$

Wird die Energie mitbetrachtet, so gilt für die Gesamtenergie

$$2\rho E = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_i^2 f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_i^2 f_i^{\text{eq}} = 2C_v \rho T + \rho \mathbf{u}^2, \quad (2.42)$$

mit der Wärmekapazität bei konstantem Volumen  $C_v$  und der relativen Temperatur  $\theta = T/T_0$ . Für die LBM mit Energieerhaltung gilt das ideale Gasgesetz  $P = \rho RT$ , hingegen wird im Fall schwach kompressibler Strömungen ohne Energieerhaltung die Temperatur konstant zu  $T = T_0 = c_s^2$  gesetzt. Der Druck ermittelt sich somit aus den Dichteschwankungen, sodass das Druckfeld nicht separat gelöst werden muss.

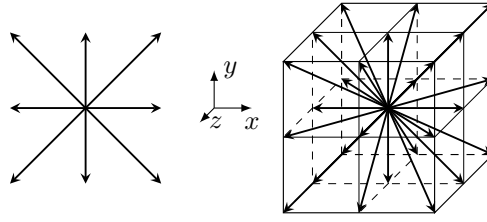
Die (kräftefreie) diskrete Boltzmann-Gleichung lautet folglich

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \xi_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial \alpha} f_i = -\frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}}). \quad (2.43)$$

Ähnlich wie im Fall der Expansionsordnung  $N$  des Gleichgewichts in Gl. (2.37), stellt sich die Frage nach dem notwendigen Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$ . Dazu ist es notwendig, die Definition der Gleichgewichtsmomente in Gl. (2.31) genauer zu betrachten, also des Integrals aus dem Produkt aus Gleichgewichtsverteilung  $f^{\text{eq}}$  und multivariaten Hermite-Polynomen  $\mathcal{H}^{(n)}$ . Die Gleichgewichtsverteilung  $f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  ist nach der Abbildung auf die Hermite-Polynome, wie in Gl. (2.37) ersichtlich, ein Polynom  $N$ -ten Grades, wobei  $N$  als Expansionsordnung des Gleichgewichts definiert ist. Damit das Moment  $\mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)}$   $n$ -ter Ordnung mit dem Moment der Maxwell-Boltzmann-Verteilung übereinstimmt, muss  $\mathcal{H}^{(n)}$  ebenso  $n$ -ter Ordnung sein. Das Produkt der beiden Polynome ergibt also ein Polynom  $(n + N)$ -ter Ordnung, sodass der Grad der Quadratur  $\mathfrak{N} \geq n + N$  betragen muss, um das Polynomprodukt exakt zu integrieren [180, 181]. Konkret bedeutet dies, dass für schwach kompressible Simulationen der Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \geq 6$  und für kompressible Simulationen der Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \geq 8$  betragen muss.

Diese Anforderung wird durch die Standard-LBM jedoch regelmäßig nicht erfüllt. Wie in der Einleitung dieser Arbeit erwähnt, ist der exakte Strömungsschritt von Gitterpunkt zu Gitterpunkt ein zentrales Merkmal der LBM, welches sich nur mit ganzzahligen Abszissenlängen erreichen lässt. Legt man der Herleitung von Geschwindigkeitsätzen die Gauß-Hermite-Quadratur zugrunde, so ist diese Anforderung der Ganzzahligkeit nur bis zu einem Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \leq 5$  mit den Abszissen  $[-\sqrt{3}, 0, \sqrt{3}]$  zu erfüllen. Hierzu werden die Abszissen der Quadratur mit  $c_s = 1/\sqrt{3}$  multipliziert, wobei  $c_s$  als eine Gitterkonstante verstanden werden kann. Abszissen von Quadraturen höheren Grades – die eigentlich zur korrekten Darstellung der Momente in Gl.





**Abbildung 2.1:** D2Q9 und D3Q27 Geschwindigkeitssatz.

**Tabelle 2.1:** Koeffizienten des zweidimensionalen Geschwindigkeitssatzes D2Q9, abgeleitet aus einer zweidimensionalen Quadratur fünfter Ordnung [194]. Die Gitterkonstante ist  $c_s = 1/\sqrt{3}$

$i$	$w_i$	$\xi_i$
0	4/9	(0, 0)
1, 2, 3, 4	1/9	( $\pm 1, 0$ ), (0, $\pm 1$ )
5, 6, 7, 8	1/36	( $\pm 1, \pm 1$ )

(2.30) notwendig wären – weisen dagegen untereinander nicht-ganzzahlige Vielfache auf. Somit können sie nicht auf ein regelmäßiges Gitter skaliert werden.

Die meistverwendeten Geschwindigkeitssätze der LBM entspringen daher der Gauß-Hermite-Quadratur fünften Grades  $\mathfrak{N} = 5$  und weisen neun Stützstellen in zwei Dimensionen und 27 Stützstellen in drei Dimensionen auf, in der Literatur zumeist mit D2Q9 und D3Q27 abgekürzt. Beide Geschwindigkeitssätze sind in Abb. 2.1 dargestellt, außerdem sind die Gewichte und Abszissen in den Tabellen 2.1 und 2.2 aufgeführt. Darüber hinaus ist es in einigen Fällen möglich, die Anzahl der Stützstellen  $Q$  zu verringern, ohne den Quadraturgrad zu verringern, wodurch bspw. auch ein D3Q15 mit 15 Stützstellen und ein D3Q19 mit 19 Stützstellen möglich werden. Diese

**Tabelle 2.2:** Koeffizienten des zweidimensionalen Geschwindigkeitssatzes D3Q27 mit  $\mathfrak{N} = 5$ , abgeleitet aus einer zweidimensionalen Quadratur fünfter Ordnung [194]. Die Gitterkonstante ist  $c_s = 1/\sqrt{3}$

$i$	$w_i$	$\xi_i$
0	8/27	(0, 0, 0)
1, ..., 6	2/27	( $\pm 1, 0, 0$ ), (0, $\pm 1, 0$ ), (0, 0, $\pm 1$ ),
7, ..., 18	1/54	( $\pm 1, \pm 1, 0$ ), ( $\pm 1, 0, \pm 1$ ), (0, $\pm 1, \pm 1$ )
19, ..., 26	1/216	( $\pm 1, \pm 1, \pm 1$ )

sind bspw. in Krüger et al. gelistet [121].

Trotz der offenkundigen Vorteile eines kleinen Quadraturgrads mit Blick auf die Anzahl der Stützstellen, führen alle genannten Geschwindigkeitssätze D2Q9, D3Q19 und D3Q27 zu einem Diskretisierungsfehler des Spannungstensors der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  [121], auf den in Abschnitt 2.5 genauer eingegangen wird. Bei der Wahl der Quadratur handelt es sich somit um einen Kompromiss. Dieser zahlt sich für schwach kompressible Strömungen jedoch aus, da die Machzahl ohnehin gering gehalten werden muss, um Kompressibilitätseffekte gegenüber den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen zu vermindern.

Generell gilt dieser Diskretisierungsfehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  nichtsdestoweniger als eine zentrale Schwäche der LBM und als Hindernis zur Simulation hoher Machzahlen. Die Semi-Lagrangesche LBM, welche in Kapitel 3 erläutert wird, bricht dagegen mit dem exakten Strömungsschritt von Gitterpunkt zu Gitterpunkt und erreicht so eine größere Flexibilität der Geschwindigkeitsdiskretisierung. Dieser Aspekt wird in Kapitel 4 vertieft.

### 2.3.3 Integration entlang der Charakteristiken

Im letzten grundlegenden Diskretisierungsschritt werden Ort und Zeit diskretisiert. Die nachfolgende Herleitung beruht auf den Arbeiten von He und Luo [91] sowie Krüger et al. [121]. Die Verteilungsfunktionen in Gl. (2.43) werden dazu entlang der Charakteristiken mit der Variable  $\zeta$  ausgedrückt [91]

$$\frac{df_i}{d\zeta} = \frac{\partial f_i}{\partial t} \frac{dt}{d\zeta} + \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = \Omega_i = -\frac{1}{\lambda} (f_i - f_i^{\text{eq}}). \quad (2.44)$$

Durch Vergleichen mit Gl. (2.43) wird ersichtlich, dass

$$\frac{dt}{d\zeta} = 1, \quad \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = \xi_{i\alpha} \quad (2.45)$$

gilt. Aus den Gleichungen (2.45) folgt durch Integrieren

$$t = \zeta + t_0, \quad \mathbf{x} = \boldsymbol{\xi}_i \zeta + \mathbf{x}_0. \quad (2.46)$$

Auf diese Weise wird die partielle Differentialgleichung (2.43) in eine gewöhnliche, inhomogene Differentialgleichung umformuliert [121].

$$\frac{df_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \zeta, t + \zeta)}{d\zeta} = \Omega_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \zeta, t + \zeta). \quad (2.47)$$

Durch Integrieren von Gl. (2.47) erhält man

$$f_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^{\delta_t} \Omega_i(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_i \zeta, t + \zeta) d\zeta, \quad (2.48)$$

wodurch die linke Seite von Gl. (2.47) exakt integriert werden kann. Die rechte Seite von Gl. (2.48) wird durch die Trapezregel approximiert

$$f_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \delta_t (\Omega_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t)) + \mathcal{O}(\delta_t^3). \quad (2.49)$$

Diese Gleichung ließe sich eigentlich nur implizit lösen. Zur Herleitung eines expliziten Schemas macht man sich zunutze, dass die Momente der Dichte, des Impulses und der Energie über den Kollisionsschritt konstant bleiben [121]. Dazu wird eine umformulierte Verteilungsfunktion  $\bar{f}_i$  mit der Definition

$$f_i = \bar{f}_i - \frac{(f_i - f_i^{\text{eq}}) \delta_t}{2\lambda}, \quad \text{bzw.} \quad f_i = \frac{\bar{f}_i + f_i^{\text{eq}} \frac{\delta_t}{2\lambda}}{1 + \frac{\delta_t}{2\lambda}} \quad (2.50)$$

eingeführt, wobei für die Gleichgewichtsfunktion  $f_i^{\text{eq}} = \bar{f}_i^{\text{eq}}$  gilt.

Nach Einsetzen von Gl. (2.50) in Gl. (2.49) führen einige wenige Umformoperationen schlussendlich zur Lattice-Boltzmann-Gleichung

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.51)$$

mit dem dimensionslosen Relaxationsparameter

$$\tau = \frac{\lambda}{\delta_t} + \frac{1}{2} \quad (2.52)$$

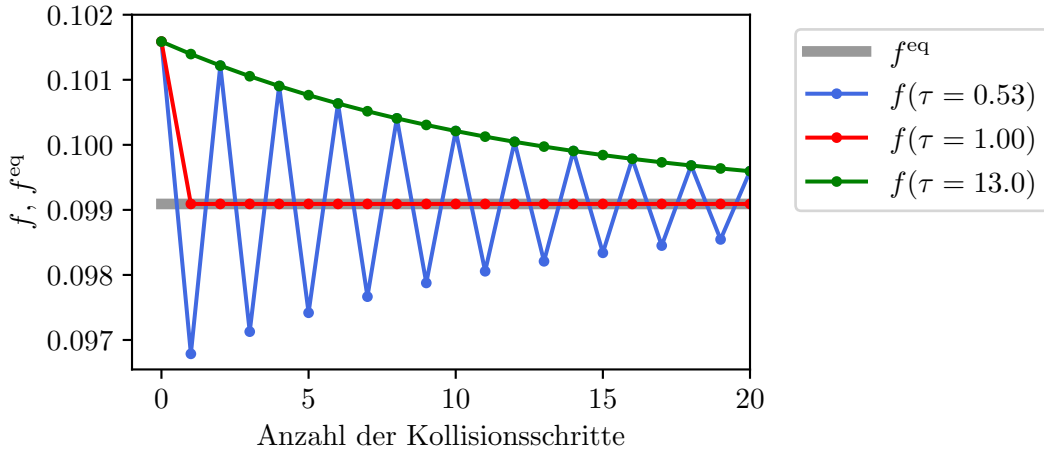
und der Relaxationszeit

$$\lambda = \frac{\mu}{P}, \quad (2.53)$$

welche von der dynamischen Viskosität  $\mu$ , der Zeitschrittweite  $\delta_t$  und dem Druck  $P = \rho RT$  abhängen. Wie bereits zuvor erwähnt, wird jedoch im Falle schwach kompressibler, isothermaler Strömungen bezogen auf die Referenztemperatur  $RT_0 = c_s^2$  gerechnet, sodass sich der Druck  $P_{\text{iso}} = P_0 + \rho c_s^2$  ergibt. Hierbei gibt  $P_0$  einen Referenzdruck an.

Durch die Integration entlang der Charakteristiken, Anwendung der Trapezregel und der Ersetzung aus Gl. (2.50) liegen alle zum Kollisionsschritt notwendigen Informationen räumlich lokal vor, was günstig für die Parallelisierbarkeit des Algorithmus ist. Fortan wird der Überstrich der Verteilungsfunktionen aus Gründen der Lesbarkeit ausgelassen, gemeint sind allerdings immer die transformierten Verteilungsfunktionen  $\bar{f}_i$ .

Neben dem aufgezeigten Weg der Integration mit der Trapezregel entlang der Charakteristiken gibt es weitere Möglichkeiten, die Lattice-Boltzmann-Gleichung in Raum und Zeit zu diskretisieren, allerdings führen alle Herleitungen dieser Art zu Gl. (2.51). Hierzu gehören Herleitungen mittels Strang-Splitting [51], mittels Taylorreihenentwicklung [117] oder mittels Verlet-Algorithmus [207].



**Abbildung 2.2:** Relaxation einer beispielhaften Verteilungsfunktionen mit der Lattice-Boltzmann-Gleichung und dem BGK-Kollisionsmodell. Während sich die diskrete Verteilungsfunktion  $f_i$  für große Relaxationsparameter  $\tau > 1$  asymptotisch dem Gleichgewicht annähern, so sorgen kleine  $\tau < 1$  dafür, dass eine Überrelaxation über das Gleichgewicht hinaus stattfindet.

## 2.4 Überrelaxation der Verteilungsfunktionen

Die Integration der rechten Seite von Gl. (2.48) mit der Trapezregel hat eine Überrelaxation der Verteilungsfunktionen zufolge, wie in Abb. 2.2 für aufeinander folgende Kollisionsschritte dargestellt. Im Sonderfall  $\tau = 1$  wird die Gleichgewichtsfunktion bereits nach dem ersten Kollisionsschritt erreicht. Für große Relaxationsparameter  $\tau > 1$  nähert sich die Verteilungsfunktion asymptotisch der Gleichgewichtsfunktion an. Für kleine Relaxationsparameter  $0.5 < \tau < 1$  dagegen oszilliert die Verteilungsfunktion um den zugehörigen Wert der Gleichgewichtsfunktion herum, allerdings existiert ein zweiter Fall mit  $\tau_2 > 1$  mit identischer einhüllender Amplitudenfunktion. Ein Zusammenhang beider einhüllender Funktionen lässt sich folgendermaßen formulieren. Es sei  $f^{[Z]} := f_i(x + Z\delta_t\xi_i, t + Z\delta_t)$  definiert und die Gleichgewichtsverteilung wird als konstant angenommen  $f_i^{\text{eq}[0]} = f_i^{\text{eq}[1]} = \dots = f_i^{\text{eq}[Z]}$ . Die Verteilungsfunktion nach einem Kollisionsschritt lautet gem. Gl. (2.51)

$$f_i^{[1]} = f_i^{[0]} - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[0]} - f_i^{\text{eq}} \right). \quad (2.54)$$

Die Verteilungsfunktionen nach zwei Zeitschritten lauten dementsprechend

$$f_i^{[2]} = f_i^{[0]} - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[0]} - f_i^{\text{eq}} \right) - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[1]} - f_i^{\text{eq}} \right). \quad (2.55)$$

Durch Einsetzen von Gl. (2.54) in Gl. (2.55) erhält man

$$f_i^{[2]} = f_i^{[0]} - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[0]} - f_i^{\text{eq}} \right) - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[0]} - \frac{1}{\tau} \left( f_i^{[0]} - f_i^{\text{eq}} \right) - f_i^{\text{eq}} \right), \quad (2.56)$$

$$f_i^{[2]} = f_i^{[0]} + \left( \frac{1}{\tau^2} - \frac{2}{\tau} + 1 \right) \left( f_i^{[0]} - f_i^{\text{eq}} \right). \quad (2.57)$$

Gesucht wird nun das Paar an Relaxationsparametern  $\tau_1 \neq \tau_2$  für das  $f_i^{[2]}(\tau_1) = f_i^{[2]}(\tau_2)$  gilt. Die sich ergebende Beziehung

$$\frac{1}{\tau_1^2} - \frac{2}{\tau_1} = \frac{1}{\tau_2^2} - \frac{2}{\tau_2}, \quad \text{bzw.} \quad \left( \frac{1}{\tau_1^2} - \frac{2}{\tau_1} \right) \tau_2^2 + 2\tau_2 - 1 = 0, \quad (2.58)$$

kann durch die Lösungsformel für allgemeine quadratische Gleichungen gelöst werden. Für  $\tau_1 = 0.53$  ergibt sich bspw.  $\tau_2 = 13.0$  wie in Abb. 2.2 dargestellt. Die Simulationen mit beiden Relaxationsparametern sind allerdings – trotz identischer Form der Amplitudenfunktionen – grundlegend verschieden, da sich, bei gleicher Zeitschrittweite, die Viskositäten beider Relaxationsparameter um den Faktor  $\nu_2/\nu_1 \approx 418$  unterscheiden.

Diese Überrelaxation der Verteilungsfunktionen in Kombination mit dem erläuterten Strömungs- und Kollisionsalgorithmus ist eine Eigenart der LBM im Vergleich zu anderen Methoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung. Über einen langen Zeitraum hinweg herrschte die Auffassung in der LBM-Literatur, dass die Überrelaxation numerischen Ursprungs ist und nicht auf physikalische Effekte zurückschließen lässt [19]. In einem kürzlich erschienenen Preprint argumentierten Pachalieva und Wagner jedoch unter Zuhilfenahme von Moleküldynamiksimulationen (MD), dass auch die Überrelaxation mit dem physikalisch begründbaren Molekülverhalten in Einklang gebracht werden kann und auf die Reduktion der Partikel per Coarse-Graining in der LBM zurückgeführt werden kann [157].

## 2.5 Fehlerbetrachtung der Lattice-Boltzmann-Methode

Der Fehler der Standard-LBM wird üblicherweise in Bezug auf die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen mit  $\partial_t \rho = \partial_\alpha \rho = 0$  bestimmt. Allerdings ist der Fehler der Standard-LBM nicht allein von der Gitterweite  $\delta_x$  und der Zeitschrittweite  $\delta_t$ , sondern auch von der verwendeten Machzahl  $Ma$  abhängig. Durch die Verwendung der Trapezregel, wie sie zur Integration entlang der Charakteristiken in Abschnitt 2.3.3 verwendet wird, ergibt sich als allererstes ein zeitlicher Fehler zweiter Ordnung  $\mathcal{O}(\delta_t^2)$  [171]. Durch die Kopplung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung ist der räumliche Fehler  $\delta_x = \delta_t \xi_i$  ebenso mit dem zeitlichen verbunden und daher gleichermaßen von der Ordnung  $\mathcal{O}(\delta_x^2)$  [190]. Darüber hinaus existieren zwei voneinander

unabhängige Modellfehler, die zuweilen in der Literatur nicht getrennt und stattdessen ebenfalls als Kompressibilitätsfehler bezeichnet werden [171]:

- a) Einerseits ergibt sich ein Fehler durch die Verwendung eines kompressiblen Löser zur Approximation der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^2)$  [171].
- b) Andererseits führt der in Abschnitt 2.3.2 erläuterte unzureichende Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$  dazu, dass die aus der Chapman-Enskog-Analyse hergeleitete Impulsgleichung von der Impulsgleichung der Navier-Stokes-Gleichung um einen Term der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  abweicht [182].

In Bezug auf die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen ergibt sich für die Standard-LBM zusammengenommen ein Gesamtfehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\delta_x^2 + \delta_t^2 + \text{Ma}^3 + \text{Ma}^2)$  [171]. Aufgrund dieses Fehlerkonglomerats konvergiert die Lattice-Boltzmann-Gleichung nur dann zu den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen, wenn die Machzahl simultan zur Gitterweite  $\delta_x$  reduziert wird [171]. Allerdings zeigt das Verfahren dann nur noch eine zeitliche Konvergenz erster Ordnung  $\mathcal{O}(\delta_t)$  [171]. Aus praktischer Sicht wird man jedoch immer eine Machzahl im Intervall  $0.01 \leq \text{Ma} \leq 0.1$  bevorzugen, um die Simulationen in einer vertretbaren Zeit zum Ziel zu bringen. Daher wird sich der Kompressibilitätsfehler a) bei hinreichend aufgelösten Simulationen nicht gänzlich vermeiden lassen.

## 2.6 Zeitintegration mit linearen Mehrschrittverfahren

In Abschnitt 2.46 wurde die Integration der diskreten BGK-Boltzmann-Gleichung entlang der Charakteristiken erläutert. Zur Integration des Kollisionsoperators in Gl. (2.47) wird üblicherweise die Trapezregel verwendet. Allerdings sind auch andere Zeitintegrationsschemata denkbar, wodurch sich potenziell die Ordnung des zeitlichen Fehlers oder die Stabilität der LBM verbessern lassen. Um den exakten Strömungsschritt von Gitterpunkt zu Gitterpunkt zu erhalten, eignen sich hierzu insbesondere lineare Mehrschrittverfahren. In der Dissertation von Krämer [113] wurde gezeigt, dass durch eine allgemeine Formulierung zur Redefinition der Verteilungsfunktionen  $f_i$  zu  $\bar{f}_i$  in Gl. (2.50), beliebige implizite Mehrschrittverfahren angewendet werden können. Dazu ist es notwendig, die Verteilungsfunktionen vergangener Zeitschritte zur Wiederverwendung in den darauf folgenden Schritten zu speichern.

Der sich so ergebende Fehler der LBM mit einem impliziten Mehrschrittverfahren der Ordnung  $\mathcal{M}$  beträgt folglich  $\mathcal{O}(\delta_x^2 + \delta_t^{\mathcal{M}} + \text{Ma}^3 + \text{Ma}^2)$  [113]. In der Arbeit von Wilde et al. [219] wurden zwei Mehrschrittverfahren eingehend untersucht und mit

der Trapezregel verglichen: Das Adams-Moulton-Verfahren dritter Ordnung (AM3)

$$f^{[+1]} = f^{[0]} - \frac{1}{\tau_0} (f^{[0]} - f^{\text{eq},[0]}) + \frac{1}{\tau_{-1}} (f^{[-1]} - f^{\text{eq},[-1]}) \quad (2.59)$$

mit den Relaxationsparametern  $\tau_0 = \frac{12}{13} \frac{\lambda}{\delta_t} + \frac{5}{13}$  and  $\tau_{-1} = 12 \frac{\lambda}{\delta_t} + 5$  unter Berücksichtigung der Schreibweise für vergangene Zeitschritte  $f^{[-Z]} := f_i(x - Z\delta_t \xi_i, t - Z\delta_t)$

sowie die Backward-Differentiation-Formula zweiter Ordnung (BDF2)

$$f^{[+1]} = \frac{4}{3} f^{[0]} - \frac{1}{3} f^{[-1]} - \frac{1}{\tau_0} (f^{[0]} - f^{\text{eq},[0]}) + \frac{1}{\tau_{-1}} (f^{[-1]} - f^{\text{eq},[-1]}), \quad (2.60)$$

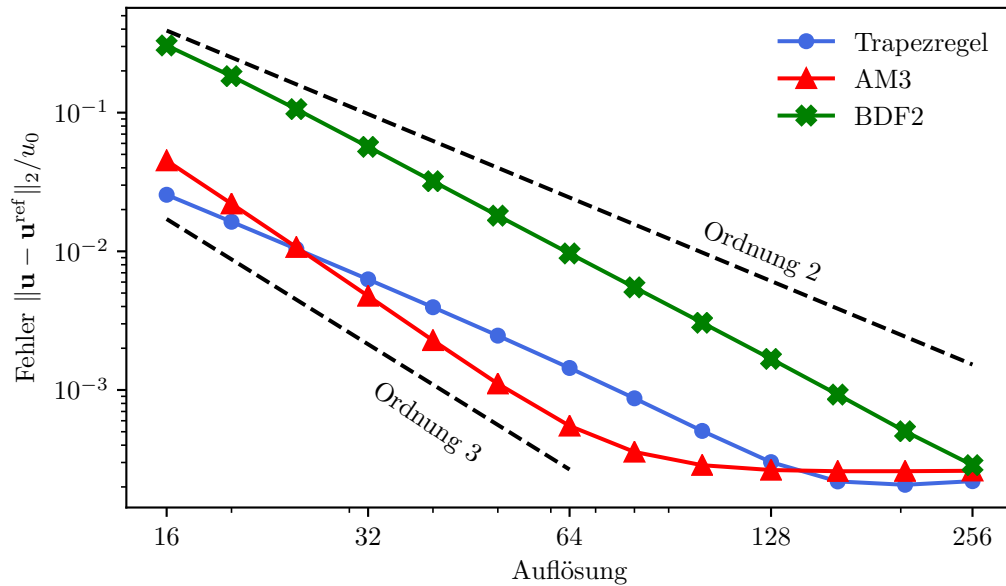
mit den Relaxationsparametern  $\tau_0 = \frac{9}{8} \frac{\lambda}{\delta_t} + \frac{3}{4}$  und  $\tau_{-1} = \frac{9}{2} \frac{\lambda}{\delta_t} + 3$ . BDF-Verfahren werden für ihre außerordentliche Stabilität bei steifen Problemen geschätzt [46]. Beide Vorschriften sind mit dem BGK-Kollisionsoperator aufgeführt, wohingegen sich eine allgemeinere Formulierung in [113, 219] findet.

Zur Quantifizierung des Fehlers dieser Verfahren in der LBM eignet sich der zweidimensionale Taylor-Green-Wirbel, der über eine analytische Lösung verfügt. Die Initialbedingungen und zugleich die zeitabhängige Lösung des Testfalls auf dem Gebiet  $S = [0, 2\pi]^2$  lauten für die Geschwindigkeiten und den Druck

$$\begin{aligned} u_x^{\text{ref}}(x, y, t) &= +u_0 \sin(x) \cos(y) \exp(-2\nu t), \\ u_y^{\text{ref}}(x, y, t) &= -u_0 \cos(x) \sin(y) \exp(-2\nu t), \\ P^{\text{ref}}(x, y, t) &= \frac{1}{4} (\cos(2x) + \cos(2y)) \exp(-4\nu t). \end{aligned}$$

Die Messung des Fehlers wurde dabei jeweils bei  $t = 1.832$  durchgeführt und die Initialgeschwindigkeit beträgt  $u_0 = 1$ . Der Abb. 2.3 kann man entnehmen, dass sowohl die Trapezregel als auch BDF2 bei einer Machzahl von  $\text{Ma} = 0.1$  den Fehler mit zweiter Ordnung reduzieren, obgleich BDF2 einen um eine Größenordnung größeren Fehler aufzuweisen hat. Im Vergleich dazu reduziert AM3 den Fehler bei steigender Auflösung mit dritter Ordnung, zumindest bis die Fehlerschranke erreicht wird, die unabhängig vom Zeitintegrationsverfahren auf die in Abschnitt 2.5 erläuterten Kompressibilitätseffekte zurückzuführen ist. Reduziert man jedoch die Machzahl, so stellt man fest, dass die Simulationen geringer Auflösung, d.h. bei geringen Viskositäten, mit AM3 generell instabil sind [219].

Dieses Problem lässt sich systematisch mit einer linearen Stabilitätsanalyse der Lattice-Boltzmann-Gleichung untersuchen, wie sie bspw. von Wolf-Gladrow durchgeführt wurde [222]. Hierbei wird der Kollisionsoperator linearisiert und anschließend einer Fourier-Transformation unterzogen; die genaue Beschreibung der Analyse findet sich in [219]. Durch dieses Vorgehen lassen sich die Stabilitätsbereiche der Mehrschrittverfahren abschätzen und es zeigt sich wie in Abb. 2.4 dargestellt, dass das AM3-Verfahren in Bezug auf die kinematische Viskosität  $\nu$  einen deutlich geringeren



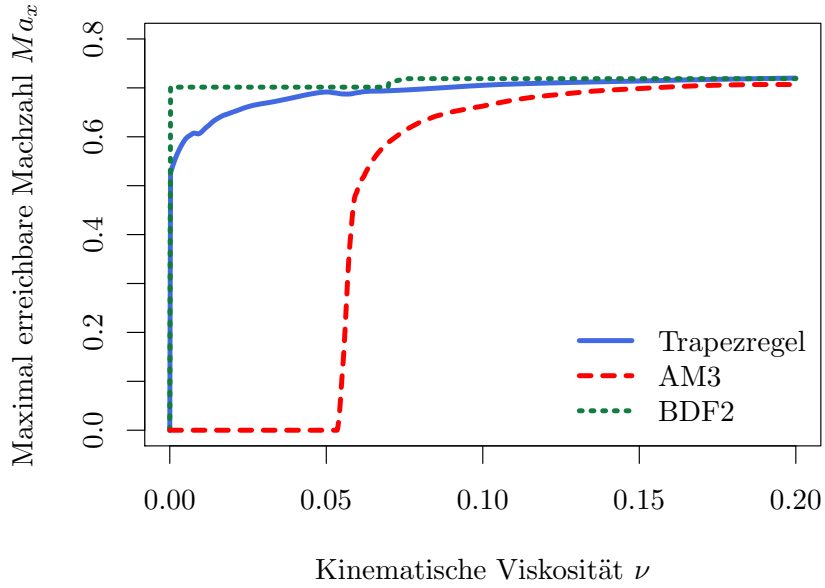
**Abbildung 2.3:** Geschwindigkeitsfehler des zweidimensionalen Taylor-Green-Wirbels verglichen mit der analytischen Lösung für drei verschiedene Zeitintegrationsverfahren. Die Trapezregel entspricht der Standard-LBM. Die Machzahl beträgt  $Ma = 0.1$ .

Stabilitätsbereich aufweist. Im Gegensatz dazu ist der Stabilitätsbereich von BDF2 gegenüber der Trapezregel bei kleinen Viskositäten deutlich erweitert. Nichtsdestotrotz kann keines der Zeitintegrationsverfahren die obere Schranke der Machzahl von  $Ma \approx 0.73$  überschreiten. Diese obere Schranke findet man auch an anderer Stelle der Literatur für die Standard-LBM mit Trapezregel [187].

Zusammengenommen decken sich die Beobachtungen mit den Erkenntnissen von Dahlquist zu linearen Mehrschrittverfahren [48]: Erstens können A-stabile Mehrschrittverfahren höchstens zweiter Ordnung sein, d.h. für höhere Ordnungen ist die Stabilität per se limitiert. Ein Verfahren gilt als A-stabil, wenn die numerische Lösung der Testfunktion  $dy/dx = Ly$  für eine unendliche Anzahl an Schritten mit fester Schrittweite gegen Null konvergiert. Hier ist  $L$  eine komplexe Zahl mit negativem Realteil [47]. Zweitens besitzt die Trapezregel unter allen Mehrschrittverfahren zweiter Ordnung den geringsten Fehler des Restglieds [48].

Insgesamt zeigt sich also, dass die Erhöhung der zeitlichen Ordnung in der LBM prinzipiell möglich ist, jedoch erweist sich die Trapezregel der Standard-LBM in vielerlei Hinsicht als optimal: Sie konvergiert mit zweiter Ordnung in Bezug auf die Zeitschrittweite, hat einen großen Stabilitätsbereich und erfordert keine Speicherung vergangener Zeitschritte. Aus diesen Überlegungen heraus wird in dieser Arbeit grundsätzlich die Trapezregel als Zeitintegrationsverfahren verwendet.





**Abbildung 2.4:** Stabilitätsgrenzen der drei Zeitintegrationsverfahren mit exaktem Strömungsschritt. Die Werte der Trapezregel entsprechen der Standard-LBM. Aus [219].

## 2.7 Alternative Kollisionsoperatoren

Die Lattice-Boltzmann-Gleichung wird normalerweise mit dem BGK-Kollisionsoperator formuliert, allerdings existieren – zumindest für schwach kompressible Strömungen – eine Vielzahl weiterer Ansätze, die hier kurz erläutert werden. Ein zentraler Kritikpunkt des BGK-Kollisionsoperators ist die mangelhafte Stabilität für kleine Relaxationsparameter  $\tau$  bei Strömungen mit hoher Reynoldszahl  $Re$  [154]. Eine Möglichkeit zur Stabilisierung ist die Anpassung der lokalen Viskosität anhand einer Entropiefunktion, was der prinzipiellen Vorgehensweise der sogenannten entropischen LBM entspricht [9, 110].

Alternativ zum einheitlichen Relaxationsparameter des BGK-Kollisionsoperators können allerdings auch die Momente mit unterschiedlichen Parametern relaxiert werden, was zu einem Multi-Relaxation-Time-Kollisionsoperator (MRT) führt. Dazu werden die  $Q$  Verteilungsfunktionen mittels der Transformationsmatrix  $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$  in  $Q$  Momente überführt [197]

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{a}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M} \mathbf{f}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.61)$$

und anschließend mit der Diagonalmatrix  $\mathbf{S}$  relaxiert

$$\mathbf{a}^* = -\mathbf{S}(\mathbf{a} - \mathbf{a}^{\text{eq}}). \quad (2.62)$$

Dabei enthalten die Einträge von  $\mathbf{S}$  die Relaxationsparameter [121]

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\tau_0} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\tau_1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\tau_{Q-1}} \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

sodass jedem Moment ein individueller Relaxationsparameter zuteil wird. Die mit den konservativen Größen Dichte und Impuls assoziierten Momente werden per Definition nicht relaxiert und bleiben während der Kollision erhalten. Außerdem werden die Schermomente zweiter Ordnung  $a_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha \neq \beta$  üblicherweise mit dem BGK-Relaxationsparameter  $\tau_{\text{BGK}}$  relaxiert, um die Physik auf Navier-Stokes-Ebene zu erhalten. Im Gegensatz dazu können die verbleibenden Momente des Wärmeflusstensors  $\mathcal{Q} = a_{\alpha\beta\gamma}$  und weitere Momente höherer Ordnung mit frei wählbaren Relaxationsparametern relaxiert werden, wodurch sich potenziell sowohl Stabilität als auch Genauigkeit verbessern lassen [188].

Nach dem Relaxationsschritt (2.63) werden die Momente durch Multiplikation von Gl. 2.61 mit  $\mathbf{M}^{-1}$  von links wieder in die relaxierten Verteilungsfunktionen  $f^*$  überführt

$$\mathbf{f}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{a}^*(\mathbf{x}, t). \quad (2.64)$$

Die Lattice-Boltzmann-Gleichung mit MRT-Kollisionsoperator lautet somit

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \delta t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} (\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{a}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.65)$$

unter Berücksichtigung von Gl. (2.61).

Die Transformationsmatrix  $\mathbf{M}$  lässt sich dabei auf zwei Wegen herleiten. Zum einen kann eine orthogonale Matrix mittels Gram-Schmidt-Orthogonalisierung gewonnen werden [126], zum anderen kann die Orthogonalität der Hermite-Polynome ausgenutzt werden, sodass sich die Matrix direkt aus dem in Abschnitt 2.3.1 aufgezeigten Vorgehen ableitet [50]. Die Wahl der Relaxationsparameter des MRT-Kollisionsmodells ist hierbei immer noch ein aktueller Gegenstand der Forschung [188]. Lätt und Chopard schlugen bspw. vor alle höheren Momente während des Kollisionsschritt zum Gleichgewicht hin zu relaxieren, was als regularisierte LBM bekannt wurde [129].

Dagegen schlugen Karlin et al. ein adaptives entropisches MRT-Modell vor, das lokal die Entropie minimiert [109] und im Gegensatz zur regularisierten LBM zu einem stabileren und gleichzeitig weniger dissipativen Schema führt [115]. Krämer et al. konnten dabei eine starke Verwandtschaft der regularisierten LBM und der entropischen MRT nachweisen [115]. Dabei wurde gezeigt, dass beide Methoden durch die lokale Maximierung einer quadratischen Taylorexansion einer Entropiefunktion abgeleitet werden können. Während die entropische MRT um die lokale Gleichgewichtsverteilung in Bezug auf die lokale Strömungsgeschwindigkeit expandiert wird,

wird bei der regularisierten LBM die Entropie um das globale Gleichgewicht mit  $\mathbf{u} = 0$  expandiert.

Neben der Relaxation der Momente existiert auch die Möglichkeit der Relaxation der Kumulanten, wie durch Geier et al. vorgeschlagen [74]. Die Ableitung einer regularisierten Nichtgleichgewichtsverteilung aus der Onsager-Reziprozitätsbeziehung ist ein relativ neuer Ansatz, welcher für sich beansprucht, in besonderem Maße die Effekte der Nichtgleichgewichtsthermodynamik zu berücksichtigen [106]. Ein weiterer innovativer Ansatz ergibt sich durch die Verbindung von neuronalen Netzen mit dem Kollisionsoperator von Bedrunka et al. [13]. Dort werden die Relaxationsparameter der höheren Momente adaptiv durch ein neuronales Netz vorgegeben. Einige Artikel der Literatur vergleichen die verschiedenen Kollisionsmodelle anhand standardisierter Testfälle, wie z.B. Hausmann et al. anhand einer abklingenden isotropen Turbulenz [90] oder Gehrke et al. anhand einer schwach kompressiblen turbulenten Kanalströmung [73].

Wie eingangs des Abschnitts erwähnt, liegt die Vielzahl der genannten Kollisionsmodelle aktuell nur für schwach kompressible Strömungen vor. Einerseits erhöht sich für kompressible LBM meist auch die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten  $Q$ , sodass die Matrix  $\mathbf{M}$  überproportional stark wächst. Andererseits erhält der Wärmefluss-tensor  $\mathcal{Q}$  seine physikalisch begründete Bedeutung zurück, sodass erst Momente der Ordnung vier und höher für frei wählbare Relaxationszeiten geeignet sind. Coreixas et al. [44] und Mattila et al. [144] erprobten daher für einfache Testfälle eine rekursive Regularisierung der höheren Momente für kompressible Strömungen und konnten so die Stabilität des Verfahrens erhöhen.

Die in der vorliegenden Arbeit erzielten Ergebnisse wurden unter Verwendung des BGK-Kollisionsoperators in Verbindung mit einem Quasi-Equilibriumsansatz nach Ansumali et al. erzielt [5], um die Prandtlzahl nach Wunsch einstellen zu können. Für weiterführende Arbeiten bietet sich allerdings die Entwicklung von speziellen Kollisionsmodellen für kompressible LBM an, um den Stabilitätsbereich des Verfahrens zu vergrößern.

## 2.8 Vor- und Nachteile der klassischen Lattice-Boltzmann-Methode

Die klassische LBM hat sich in den letzten Jahrzehnten zu einer etablierten Methode der numerischen Strömungssimulation entwickelt. Als ein wesentlicher Vorteil der Methode ist dabei die Lokalität des nichtlinearen Kollisionsoperators zu nennen, während der Strömungsschritt linear ist und als einfache Verschiebeoperation der Verteilungsfunktionswerte zu den Nachbarknoten realisiert werden kann. Dies macht die Methode attraktiv für die Nutzung von GPUs, da auf die Berechnung von Gradienten meist verzichtet werden kann und die relativ teuren Operationen zur Berechnung der

Gleichgewichtsverteilung lokal an den jeweiligen Gitterpunkten ablaufen.

Leider unterliegt das Verfahren in seiner ursprünglichen Form einer Reihe methodenbedingter Nachteile. Die Konvergenz der LBM ist generell auf zweite Ordnung in Raum und Zeit beschränkt, was auf die Integration der Verteilungsfunktionen entlang der Charakteristiken mittels Trapezregel und die punktweise Darstellung der Verteilungen zurückzuführen ist [114]. Zudem ist die ursprüngliche LBM an die Verwendung kartesischer Gitter gebunden, die in alle Raumrichtungen dieselben Gitterabstände aufweisen müssen. Die Entwicklung von Rechteckgittern in der LBM ist dabei Gegenstand der Forschung [92, 177]. Dieses Vorhaben wird jedoch dadurch erschwert, dass die gängigen Geschwindigkeitssätze wie D2Q9 und D3Q27, wie in den vorherigen Abschnitten diskutiert, aus der Gaußschen Produktregel der Geschwindigkeitsdiskretisierung resultieren. Eine asymmetrische Verzerrung der Stützstellen führt somit dazu, dass die Ordnung der Quadratur nicht mehr erreicht wird. Zum Beispiel lässt das Modell von Zhou diesen Zusammenhang unberücksichtigt [232], weshalb das Modell Fehler im Spannungstensor aufweist, die vom Seitenverhältnis des Rechteckgitters abhängen. Dadurch werden die Navier-Stokes-Gleichungen durch dieses LBM-Modell nicht genau genug approximiert [33]. Ein gegenwärtiger Trend in der Forschung ist daher, diese Fehler des Spannungstensors im Modell zu berechnen und während der Simulation zu korrigieren [177]. Hierfür muss jedoch die Lokalität des Kollisionsschrittes aufgegeben werden, da die Korrekturterme durch Gradienten mittels Finite-Differenzen-Methode berechnet werden. Ein anderer etablierter Lösungsansatz sind außerdem Methoden der Gitterverfeinerung, bei denen Gebiete größerer Gitterabstände mit Gebieten feinerer Auflösung nebeneinander simuliert und auf geeignete Art und Weise gekoppelt werden [28, 54, 125]. Insbesondere die Rekonstruktion der Verteilungsfunktion auf dem jeweils kleineren Gitter ist die zentrale Herausforderung dieses Lösungsansatzes.

Ein weiterer Nachteil der LBM stellt außerdem die Beschränkung der Methode auf kleine Machzahlen dar, was auf zwei Ursachen zurückgeführt werden kann: Für die Approximation der inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen mit einem kompressiblen Löser – wie der LBM – ist es notwendig, dass die Machzahl möglichst klein gewählt wird, um Kompressibilitätseffekte zu minimieren. In der Literatur findet man häufig den Grenzwert von  $Ma < 0.3$  für schwach kompressible Simulationen, allerdings trifft man diesen Wert in Simulationen mit der LBM praktisch nie an. Grund hierfür ist, dass der – vom Kompressibilitätsfehler unabhängige – Fehler der Geschwindigkeitsdiskretisierung mit  $\mathcal{O}(Ma^3)$  ansteigt. Dennoch sorgt eine zu hohe Machzahl dafür, dass insbesondere turbulente Simulationen instabil werden können, weswegen die Literatur empfiehlt, die Machzahl kleiner als  $Ma < 0.1$  zu halten [121]. Da die Zeitschrittweite der LBM indes von der Machzahl abhängt, wird die ohnehin kleine Zeitschrittweite transienter Simulationen hierdurch zusätzlich verringert. Sieht man von der Änderung der Machzahl oder der Gittergröße ab, so bietet die LBM durch ihre Kopplung von Zeit- und Ortsdiskretisierung keine weitere Möglichkeit, die Zeitschrittweite zu ändern.

Ein naheliegendes Mittel zum Durchbrechen viele dieser Einschränkungen ist eine alternative Diskretisierung des Advektionsschritts. Lattice-Boltzmann-Methoden, welche ohne die exakte knotenweise Advektion auskommen bzw. auskommen müssen, werden Off-Lattice-Boltzmann-Methoden genannt. Dieser Sammelbegriff schließt einerseits Eulersche Zeitintegrationsverfahren mit ein, wie Finite-Volumen- [160, 208], Finite-Elemente- [55, 135] oder Finite-Differenzen-LBM [57, 93], andererseits kann auch die Lagrangesche Zeitintegration entlang der Charakteristiken weiter verfolgt werden. Im letzteren Fall kommt häufig eine Interpolation zum Einsatz, wobei sich aus der Menge der interpolationsbasierten LBM die Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode (SLLBM) als eine ausgereifte Variante etabliert hat [52, 114, 116]. Die in der vorliegenden Arbeit entwickelte SLLBM für kompressible Strömungen ist Thema des nächsten Kapitels.



# 3 Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode für kompressible Strömungen

---

*“I am, and ever will be, a ‘white socks’, ‘pocket protector’, nerdy engineer, born under the second law of thermodynamics, steeped in steam tables, in love with free-body diagrams, transformed by Laplace and propelled by compressible flow.”*

– Neil Armstrong

Das vorherige Kapitel befasste sich mit den Grundlagen der Lattice-Boltzmann-Gleichung, welche ebenso die Basis für das kompressible Modell dieser Arbeit bilden. Nach einem Überblick der kompressiblen Modelle der Navier-Stokes-Gleichungen wird in diesem Kapitel die Entwicklung der bisher vorgeschlagenen kompressiblen LBM erläutert und eine Kategorisierung unternommen. Anschließend folgt die Erläuterung der Semi-Lagrangeschen Lattice-Boltzmann-Methode sowie die Erweiterung der Methode auf kompressible Strömungen. Zum Abschluss des Kapitels werden einige grundlegende Randbedingungen erläutert.

## 3.1 Kompressible Löser auf Basis der Navier-Stokes-Gleichungen

Ein verbreitetes Verfahren zur Diskretisierung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen sind die kompakten Finite-Differenzen-Schemata hoher Ordnung von Lele [133], sowie die Upwind-Finite-Differenzen von Adams und Shariff [1]. Upwind-Diskretisierungen dämpfen zwar inhärent die größten aufgelösten Wellenzahlen und tragen ihrerseits zur Stabilisierung der Simulationen bei [163], allerdings werden Upwind-Schemata für die hohe numerische Dissipation kritisiert [159]. Nichtsdestotrotz wurden mit diesen Verfahren beispielsweise erfolgreich Simulationen hoher

Machzahlen mit Kompressibilitätseffekten, wie z.B. turbulenten Kanalsimulationen, durchgeführt [63]. Hingegen sind zentrale Finite-Differenzen-Schemata anfällig für Instabilitäten bei Stößen innerhalb der Simulation [163], wie sie beispielsweise bei der supersonischen Umströmung von Objekten auftreten (s. Abschnitt 5.3.3). In diesem Fall bedarf es zusätzlicher Strategien, um die stoßbehaftete Simulationen zu stabilisieren, ohne jedoch die turbulenten Strukturen numerisch zu dämpfen [105].

Grundsätzlich werden bei stoßbehafteten Strömungen zwei verschiedene Ansätze unterschieden: Shock Fitting und Shock Capturing. Bei ersterem wird der Verlauf des Stoßes in der Simulation verfolgt, sodass der Stoß selbst eine Randbedingung innerhalb der Simulationsdomäne darstellt. Die Werte beiderseits des Stoßes werden dann durch die Rankine-Hugoniot-Stoßbedingungen ermittelt und als Randwerte der Simulationsdomänen auf beiden Seiten des Stoßes vorgegeben [231].

Beim Shock Capturing hingegen ist der Stoß selbst Teil der Simulation, allerdings stellt der steile Gradient der makroskopischen Größen die Löser vor Probleme. Dies gilt vor allem, wenn der Stoß als scharfe Diskontinuität in Erscheinung tritt. Die Einführung künstlicher Viskosität (engl. Artificial Viscosity) ist daher eine der Möglichkeiten zur Verschmierung des Stoßes über mehrere Gitterpunkte hinweg [24]. Diese Technik wird meist mit einem Stoßsensor kombiniert, um die Viskosität räumlich begrenzt in der Nähe der Stöße einzubringen. Ansätze dieser Art werden für ihre starken Diffusionseffekte kritisiert, insbesondere wenn Turbulenz und Stöße gleichermaßen auftreten [105]. Ein Vorschlag von Cook zielte daher darauf ab, nur die hohen Wellenzahlen der Simulation durch die Einführung von geeigneten Diffusionstermen zu dämpfen [38]. Eine andere Möglichkeit, dies zu erreichen, sind Filteroperationen der makroskopischen Größen, wie sie beispielsweise von Mathew et al. untersucht wurden [143].

Eine weitere, sehr verbreitete Option sind die WENO-Verfahren (Weighted-Essentially-Nonoscillatory), die eine Kombination gewichteter Finite-Differenzen-Schablonen niedrigerer Ordnung in der Simulation verwenden und so die Oszillationen nahe der Stöße reduzieren, während die hohe Ordnung der Lösung in den glatten Regionen erhalten bleibt [138, 185]. Die verschiedenen WENO-Verfahren wurden in einer Reihe von Arbeiten untersucht und verglichen, z.B. mit kompressiblen Taylor-Green-Wirbeln von Lusher und Sandham [142] oder mit homogener kompressibler Turbulenz von Brehm et al. [22]. Darüber hinaus wurden in den letzten Jahren kompressible Strömungen mit und ohne Stöße mehrfach durch WENO-Finite-Differenzen-Methoden oder Variationen untersucht, darunter turbulente, supersonische Kanalsimulationen [87, 227, 230], turbulente Freistrahlsimulationen [137] oder Anströmungen dreidimensionaler Kugeln [152]. Neben Unterschieden in Bezug auf die Genauigkeit der verschiedenen WENO-Schemata, ist der hohe Aufwand zur wiederkehrenden Wertermittlung der verschiedenen Finite-Differenzen-Schablonen der größte Kritikpunkt dieser Verfahren.

Im Jahr 2011 stellte Pirozzoli in seinem Review zu kompressiblen CFD-Simulationen



fest, dass unstrukturierte Gitter bei supersonischen, turbulenten Simulationen bisher noch eher die Ausnahme sind [163]. Seither haben sich Finite-Volumen- oder Discontinuous-Galerkin-Verfahren hoher Ordnung als Alternativen zu Finite-Differenzen-Lösern zur Simulation kompressibler Strömungen entwickelt. Als Beispiel ist eine Finite-Volumen-Methode hoher Ordnung von Liu et al. zu nennen [139]. Hiermit wurden ein zweidimensionales trans- und supersonisches NACA0012-Tragflächenprofil berechnet wie auch eine Stoß-Grenzschicht-Wechselwirkung. Bekannte, frei verfügbare Löser sind der Discontinuous-Galerkin-Löser *SU2* zur Berechnung transsonischer Strömungen [36], sowie der Löser Nektar++. Die Erweiterung dieses Löser von Yan et al. nutzt implizite Zeitintegrationsverfahren, um die Zeitschrittrestriktion expliziter Zeitintegrationsverfahren bei kleinen Zellgrößen zu umgehen [225]. Außerdem existiert mit *PyFR* ein Code auf Basis der Methode der Flux Reconstruction [102], welche eine Abwandlung der Discontinuous-Galerkin-Verfahren darstellt und kürzlich beispielsweise zur Berechnung einer transsonischen, dreidimensionalen Turbinenschaufel eingesetzt wurde [104].

Zusammengenommen stellen die bei transsonischen und supersonischen Strömungen häufig auftretenden Diskontinuitäten große Herausforderungen für Löser (hoher Ordnung) der Navier-Stokes-Gleichungen dar. Dabei ist der Stand der Technik dieser Methoden nicht ganz so weit entwickelt wie Methoden für inkompressible und turbulente Strömungen, allerdings ist die Anzahl der Arbeiten weit geringer. Als eine Alternative zu den genannten Methoden, die auf den Navier-Stokes-Gleichung basieren, entwickelten sich in den letzten Jahren außerdem kompressible LBM auf Basis der Boltzmann-Gleichung, die im kommenden Abschnitt verglichen und kategorisiert werden.

## 3.2 Stand der Technik kompressibler Lattice-Boltzmann-Methoden

Obwohl die LBM Dichteschwankungen zur Berechnung des lokalen Drucks verwendet, ist die Methode in ihrer Standarddiskretisierung nicht in der Lage, stark kompressible und supersonische Strömungen zu berechnen. Bei näherem Blick auf die geschickte Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung wird klar, dass vor allem der in Abschnitt 2.5 erläuterte Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  hohe Machzahlen verhindert, weshalb Modifikationen der LBM zur Simulation kompressibler Simulationen notwendig sind.

Während die LBM-Modelle für schwach kompressible Strömungen insgesamt vergleichsweise homogen sind und sich meist nur bzgl. der Wahl des Kollisionsoperators oder der Randbedingungen unterscheiden, so gibt es für kompressible LBM viele Ansatzpunkte möglicher Modifikationen. Dies hat zur Folge, dass sich bisher kein klares Standardmodell für kompressible Strömungen herausgebildet hat [64]. Mögliche Ansatzpunkte von Modifikationen sind der Advektionsschritt, die Geschwindig-

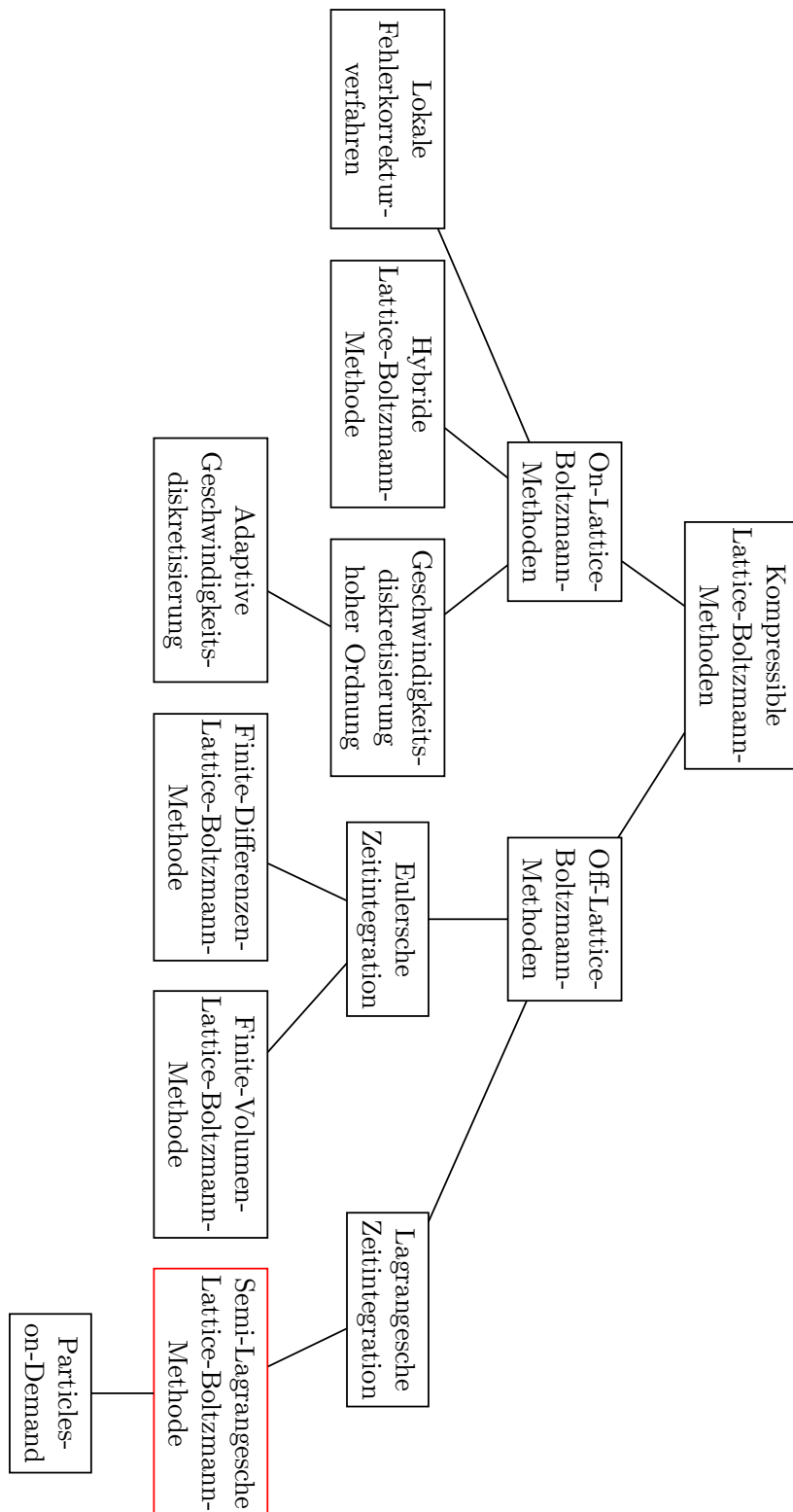


Abbildung 3.1: Übersicht der verschiedenen Kategorien kompressibler LBM.

keitsdiskretisierung, der Weg zur Berechnung der thermischen Energie oder die Diskretisierung der Gleichgewichtsfunktion. Dies erklärt die Vielzahl der verschiedenen LBM-Modelle für kompressible Strömungen.

Abb. 3.1 zeigt eine mögliche Kategorisierung der kompressiblen LBM-Modelle hinsichtlich des Strömungsschritts. Aufgrund der großen Unterschiede in der Implementierung werden zunächst Modelle mit exaktem Strömungsschritt – also die On-Lattice-Boltzmann-Methoden – von den Off-Lattice-Boltzmann-Methoden unterscheiden. Letztere nutzen für den Strömungsschritt entweder Eulersche Zeitintegrationsverfahren oder sie integrieren ebenso wie die Standard-LBM im Sinne einer Lagrangeschen Zeitintegration entlang der Charakteristiken und nutzen dann eine Form der Interpolation der Verteilungsfunktionswerte.

Als Pionierarbeit für kompressible Strömungen gilt ein On-Lattice-Boltzmann-Modell mit variabler Schallgeschwindigkeit von Alexander et al. [2], welches jedoch aufgrund der einfachen D2Q7-Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums auf isothermale Strömungen beschränkt blieb. In der Folge wurden weitere Modelle vorgeschlagen, die meist der Approximation der Euler-Gleichungen dienten, wie z.B. das D2Q17-Modell von Guangwu et al. [79]. Generell gilt für die ersten kompressiblen LBM-Modelle, dass sie oft über eine Vielzahl von numerisch motivierten, einstellbaren Parametern verfügten, weil man die Gleichgewichtsfunktion so gestaltete, dass sich bei einer Chapman-Enskog-Entwicklung die gewünschte Zielfunktionen, d.h. die kompressiblen Euler- oder Navier-Stokes-Gleichungen, ergaben.

## Finite-Differenzen-LBM

Als Alternative zur starren Kopplung der On-Lattice-Boltzmann-Methoden in Bezug auf die Diskretisierungen von Zeit, Raum und des Geschwindigkeitsraum, wurden Off-Lattice-Boltzmann-Methoden von Beginn an als Alternative herangezogen, hierunter die Finite-Differenzen-Methode. Modelle dieser Kategorie sind die Arbeiten von Shi et al. [183] und Kataoka und Tsutahara [111]. Diese Modelle verfügen über frei einstellbare Parameter, deren Wahl entscheidend für stabile Simulationen sind [183]. Pan et al. zeigten außerdem, dass das Finite-Differenzen-Modell von Kataoka und Tsutahara [111] für Machzahlen über  $Ma > 1$  instabil ist [158]. Die Autoren schlugen daher vor, einen zusätzlichen Dissipationsterm einzuführen, der den Stabilitätsbereich bis  $Ma \approx 30$  erweiterte. Eine weitere Verbesserung des Modells wurde durch Watari und Tsutahara eingeführt [216], die erkannten, dass eine hohe Isotropie der diskreten Geschwindigkeitssätze auch zu höherer Stabilität der Simulationen beiträgt. Watari führte später auch ein erstes dreidimensionales Finite-Differenzen-Modell zur Approximation der Euler-Gleichungen ein [215]. Die Stabilität des Finite-Differenzen-Modells konnten Esfahanian und Ghadyani ebenso durch Einführung eines Stoßsensors verbessern [56].

## Finite-Volumen-LBM

Abgesehen von den genannten Finite-Differenzen-Modellen existieren im Feld der Verfahren mit Eulerscher Zeitintegration einige kompressible Finite-Volumen-Modelle [61, 168, 170]. Der bekannteste Vertreter dieser Kategorie ist das Discrete-Unified-Gas-Kinetic-Scheme (DUGKS) [83, 84, 212]. Hierbei handelt es sich einerseits um eine Weiterentwicklung der Gas-Kinetic-Schemes (GKS) [23, 196, 224], welche den Geschwindigkeitsraum der Boltzmann-Gleichung kontinuierlich lösen und keine Diskretisierung vornehmen, sowie andererseits der Unified-Gas-Kinetic-Schemes (UGKS) [223], welche zusätzlich eine Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums vornehmen. Insgesamt gibt es bei DUGKS somit eine starke Verwandtschaft mit der DVM (vgl. Abschnitt 2.2) zur Berechnung verdünnter Gase, allerdings lässt sich DUGKS ebenso den Finite-Volumen-LBM zuordnen, da sie den Kollisionsoperator ähnlich wie in Abschnitt 2.3.3 mit einer Trapezregel inkl. Redefinition der Verteilungsfunktionen lösen.

Für schwach kompressible Strömungen konnten mit der DUGKS auch Simulationen von Kanalströmungen und des dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbels nachgewiesen werden [16]. Mithilfe der Hermite-Projektion von Shan et al. [181, 182] konnte die DUGKS mit einem D3Q77 Geschwindigkeitssatz vor kurzem auch auf kompressible dreidimensionale Strömungen erweitert werden [30, 217]. Somit ist die DUGKS eine aktuelle, relevante Off-Lattice-Boltzmann-Methode mit Eulerscher Zeitintegration, allerdings ist sie aufgrund der räumlichen Diskretisierung zweiter Ordnung relativ dissipativ [113].

## Diskretisierungen der Gleichgewichtsfunktion

Neben den in Abb. 3.1 aufgezeigten Unterschieden in Bezug auf die Diskretisierung des Strömungsschritts gibt es – kategorieübergreifend – verschiedene Ansätze bezüglich der verwendeten Gleichgewichtsfunktion. In der Anfangszeit der LBM war zunächst unklar, wie genau die polynomielle Entwicklung des Gleichgewichts und die Geschwindigkeitsdiskretisierung in Zusammenhang standen, so dass nahezu jede Arbeit neue Ansätze der Gleichgewichtsfunktion vorschlug.

Hier konnten die Arbeiten von Shan et al. [181, 182] und Philippi et al. [162] einen Beitrag zu diesem Thema leisten, da die Autoren eine konsistente Herleitung der LBM aus der Boltzmann-Gleichung aufzeigten und über eine Abbildung der Boltzmann-Gleichung auf Hermite-Polynome auch diskrete Gleichgewichtsverteilungen hoher Ordnung ermöglichten. Die polynomielle Entwicklung des Gleichgewichts wurde in der Folge beispielsweise von Surmas et al. [203] genutzt, um einfache kompressible Probleme in zwei Dimensionen mittels einer weiterentwickelten Finite-Differenzen-LBM zu berechnen. Neben der polynomiellen Entwicklung entwickelten sich noch weitere Richtungen für die Gleichgewichtsfunktion. Dazu gehören numerische Approximationen der Maxwell-Boltzmann-Verteilung, bei welchen die diskrete Gleichgewichts-

funktion mittels Lagrange-Multiplikatoren ermittelt wird, sodass alle konservativen Momente erhalten bleiben und gleichzeitig das H-Kriterium minimiert wird [6, 10]. Eine mögliche Darstellungsform der numerischen Gleichgewichtsfunktion ist [130]

$$f_i^{\text{eq}} = \rho \exp \left[ - \left( 1 + \sum_{p,q,r} \Lambda_{pqr} \xi_x^p \xi_y^q \xi_z^r \right) \right], \quad (3.1)$$

wobei  $\Lambda_{pqr}$  die Lagrange-Multiplikatoren bezeichnet und die Nebenbedingungen

$$\sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\text{eq}} \xi_x^p \xi_y^q \xi_z^r - M_{pqr}^{\text{MB}} = 0, \quad H = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i \left[ \ln \left( \frac{f_i}{\rho} \right) \right] \quad (3.2)$$

erfüllt werden müssen. In diesem Zusammenhang definiert  $M_{pqr}^{\text{MB}}$  die unmittelbar aus der Maxwell-Boltzmann-Verteilung errechneten Momente. Unterschiede zwischen den Modellen existieren ferner in der Anzahl der zu optimierenden Momente, wobei zumindest die konservativen Größen Dichte, Impuls und Energie in die Ermittlung des Gleichgewichts mit einfließen. Frapoli et al. konnten außerdem zeigen, dass die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten reduziert werden kann, sofern ausreichend weitere Momente bei der Berechnung des numerischen Gleichgewichts berücksichtigt werden [65].

Eine letzte weniger verbreitete Methode ist die Ersetzung der Maxwell-Boltzmann-Verteilung durch eine Kreisfunktion (engl. *circular function*) [82]. Während die Geschwindigkeitssätze auch bei dieser Methode fixiert sind, wird die Gleichgewichtsfunktion abhängig von der lokalen Fluidgeschwindigkeit mithilfe einer Kreisfunktion berechnet, sodass die Nebenbedingungen der Masse-, Impuls- und Energieerhaltung erfüllt sind. Anschließend wird die so ermittelte kontinuierliche Kreisfunktion in Bezug auf die diskreten Geschwindigkeiten interpoliert [134].

## Ansätze reiner On-Lattice-Boltzmann-Methoden

Neben den genannten Off-Lattice-Methoden gab es auch einige Ansätze mit dem exaktem Strömungsschritt der On-Lattice-Boltzmann-Methoden. Palmer und Rector nutzten hierzu eine zweite Verteilungsfunktion zur Repräsentation der Energie, die dann mit der ersten Verteilungsfunktion mittels Kraftterm gekoppelt wurde. Dies hat den Nachteil, dass die Erwärmung des Fluids durch Reibung vernachlässigt wurde. Dies ist ein strukturelles Problem von LBM mit separaten Verteilungsfunktionen, welche die gesamte Energie auf der zweiten Verteilungsfunktion abbilden. Diese Modelle eignen sich daher meist nur für schwach kompressible Strömungen.

Bei den später erschienenen On-Lattice-Boltzmann-Modellen von Frapoli et al. wurde die Energie der translatorischen Freiheitsgrade des Fluids dagegen durch die erste Verteilungsfunktion wiedergegeben. Diese Arbeiten waren wegweisend für die weitere Entwicklung der LBM für kompressible Strömungen [64, 66, 67]. Im Gegensatz zu früheren Arbeiten kamen bei Frapoli et al. Geschwindigkeitssätze hoher Ordnung mit

äquidistanten Stützstellen und mit bis zu 343 diskreten Geschwindigkeiten in drei Dimensionen zum Einsatz, womit das Modell u.a. durch die Simulation einer dreidimensionalen isotropen Turbulenz und die Anströmung einer Onera M6-Tragfläche validiert wurde. Außerdem zeichnet sich das Modell durch die exakte knotenweise Advektion aus, die jedoch verhindert, dass die Zeitschrittweite angepasst werden kann.

Eine Möglichkeit, um die Effizienz der On-Lattice-Boltzmann-Modelle zu verbessern, ist die Reduktion der diskreten Geschwindigkeiten. Werden On-Lattice-Boltzmann-Methoden jedoch mit Geschwindigkeitssätzen niedrigen Grades kombiniert, wie z.B. mit D2Q9, so treten Fehler in den Stress- und Wärmeleitungstensenoren auf, wie in Abschnitt 2.3.2 diskutiert. Ein anderer Ansatz ist daher, lokale Fehlerkorrekturverfahren einzusetzen, wie z.B. in [165, 166] und zuletzt durch Saadat et al. auch als Erweiterung für dreidimensionale Strömungen vorgeschlagen [176, 177]. Zur Ermittlung der Fehlerterme werden dabei häufig nichtlokale Finite-Differenzen-Schemata eingesetzt.

## Adaptive Geschwindigkeitsdiskretisierungen

Der Betrag der Fehler in den Einträgen der Spannungs- und Wärmeleitungstensenoren ist von der lokalen Strömungsgeschwindigkeit abhängig. Allerdings kann dieser Fehler reduziert werden, wenn sich die Bezugsgeschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung an der lokalen oder mittleren Strömungsgeschwindigkeit orientiert. Deshalb wurde von Frapolli et al. ein Ansatz entwickelt, um verschobene Geschwindigkeitssätze einzusetzen, bei denen die Bezugsgeschwindigkeit einen ganzzahligen Wert annimmt [68]. Auf diese Weise kann die Ausgangsgeschwindigkeit der Geschwindigkeitssätze um einen oder mehrere Knotenpunkte verschoben werden, was zur Stabilität der Methode beiträgt [99]. Dies ist jedoch nur dann möglich, wenn eine klare Vorzugsgeschwindigkeit vorherrscht, wie dies bei der Anströmung von Objekten der Fall ist.

Andere Strömungen, bei denen hohe Machzahlen in alle Raumrichtungen auftreten, erfordern dynamische Ansätze, wie sie von Sun [199–201], Dorschner et al. [53] und Coreixas und Lätt [43] vorgeschlagen wurden, welche dafür allerdings den Rechenaufwand erhöhen. Die von Dorschner et al. eingeführte Methode der Particles-on-Demand (PonD) reizen dieses Prinzip maximal aus, indem sie die den Bezugsrahmen für jeden Zeit- und Gitterpunkt anhand der lokalen Strömungsgeschwindigkeit und -temperatur neu ermittelt und die Geschwindigkeitssätze entsprechend anpasst. Auf diese Weise werden die Machzahlabhängigen Fehler der LBM eliminiert, allerdings ist eine fortwährende, rechenintensive Umrechnung der Bezugsrahmen notwendig. Dieser Ansatz wurde ebenso in einer Vielzahl von Arbeiten untersucht, wie [229, 233, 234] und stellt eine vielversprechende Möglichkeit dar, um die LBM auf extrem hohe Machzahlen zu erweitern.

## Hybride LBM

Einen Sonderfall unter den kompressiblen LBM stellen hybride Ansätze dar. Hierbei wird die Massen- und Impulsgleichung weiterhin durch einen On-Lattice-Boltzmann-Ansatz gelöst, während die thermische Energie direkt über die Energieerhaltungsgleichung bzw. die Entropiegleichung gelöst wird, wozu meist Finite-Differenzen-Schemata zum Einsatz kommen [156]. Eine Eigenart dieser Modelle ist, dass die Schallgeschwindigkeit über die Referenztemperatur des Systems reduziert werden kann, wodurch die Zeitschrittweite gesenkt werden und die Stabilität in gewissen Grenzen erhöht werden kann [172]. Dies ist bei kompressiblen On-Lattice-Boltzmann-Methoden regelmäßig nicht möglich.

Das hybride LBM-Modell von Nie mit einem D3Q39-Geschwindigkeitssatz mit  $\mathfrak{N} = 7$  [156] wird auch im kommerziellen LBM-Softwarepaket *PowerFlow* zur Lösung kompressibler Strömungen genutzt [42, 59]. Darüber hinaus existieren Weiterentwicklungen hybrider LBM mit D3Q19-Geschwindigkeitssätzen und entsprechenden Korrekturtermen [32, 60, 80, 81]. Die hybriden LBM sind aufgrund des geringen Rechenaufwands für Machzahlen bis  $Ma \leq 2.0$  ein kompetitiver Ansatz zur Simulation kompressibler Strömungen. Sie sind jedoch, ähnlich wie die Standard-LBM, auf zweite Ordnung in Raum und Zeit und kartesische Gitter beschränkt, obgleich es Methoden der Gitterverfeinerung gibt [60]. Darüber hinaus ist die direkte Ableitung der Methode aus der Boltzmann-Gleichung gebrochen, da die Energiegleichung separat gelöst wird [80]. Eine Erweiterung auf verdünnte Strömungen ist daher vermutlich mit diesem Ansatz nicht möglich.

## Interpolationsbasierte Ansätze

Die im nachfolgenden Abschnitt erläuterte Semi-Lagrangesche LBM gehört zu den interpolationsbasierten Ansätzen, die in Anlehnung an die Standard-LBM eine Lagrangesche Zeitintegration aufweisen. Da interpolationsbasierte Ansätze in der Anfangszeit der LBM relativ stark kritisiert wurden [126], fanden sich in der Folge nur wenig interpolationsbasierte Modelle für kompressible oder thermale Strömungen, darunter ein Modell von Vahala et al. [209] zur Berechnung von thermalen Strömungen. Eine wesentliche Schwachstelle der ersten interpolationsbasierten LBM-Modelle war die relativ schlichte Vorgehensweise bei der Interpolation, bei der nur wenig umliegende Stützstellen zur Interpolation eingesetzt wurden [169] und die Interpolation zumeist nur zweite Ordnung aufwies. Die Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode ist somit eine klare Verbesserung, welche im nächsten Abschnitt eingehend erläutert wird.

### 3.3 Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode

Die Semi-Lagrangesche Lattice-Boltzmann-Methode (SLLBM) wurde von Krämer et al. [114] als grundlegende Erweiterung des regulären LBM-Advektionsschritts eingeführt und in weiterführenden Arbeiten von Krämer et al. [113, 116], Di Ilio et al. [52] und Wilde et al. [218, 220] eingehend untersucht.

Die Grundidee ist, dass der exakten Strömungsschritt der Standard-LBM durch einen Semi-Lagrangeschen Strömungsschritt mit Interpolation ersetzt wird. Dazu wird das Simulationsgebiet in  $N_{\Xi}$  Zellen unterteilt. Jede Zelle  $\Xi$  besitzt eine definierte Anzahl  $N_j$  an Stützstellen  $\mathbf{x}_j$  und jeder der Stützstellen verfügt über  $Q$  Verteilungsfunktionswerte  $\hat{f}_{i\Xi j}$ .

Mittels der Stützstellen wird eine polynomielle Basis mit den Ansatzfunktionen  $\psi_{\Xi j}(\mathbf{x})$  definiert, sodass jeder beliebige Punkt innerhalb einer Zelle  $\Xi$  rekonstruiert werden kann

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{N_j} \hat{f}_{i\Xi j}(t) \psi_{\Xi j}(\mathbf{x}). \quad (3.3)$$

Als Ansatzfunktionen werden in dieser Arbeit grundsätzlich Lagrange-Polynome verwendet.

Nun gilt es, die zu interpolierenden Punkte zu ermitteln, um den Strömungsschritt durchführen zu können. Eine schematische Darstellung hierzu ist in Abb. 3.2 zu finden. Wie in Abschnitt 2.3.3 erläutert, erfolgt die Propagation der Verteilungsfunktionswerte entlang der Charakteristiken  $\xi_i$ . Ausgehend von jeder Stützstelle  $\mathbf{x}_j$  folgt die SLLBM daher jeder einzelnen der  $Q$  Charakteristiken der Lattice-Boltzmann-Gleichung rückwärts in der Zeit, um den zugehörigen Departure-Point (DP)  $\mathbf{x}_j - \delta_t \xi_i$  zu finden. Der DP befindet sich dabei in Zelle  $\Xi'$ , die identisch zur Zelle  $\Xi$  der Stützstelle sein kann, es kann sich jedoch auch um eine benachbarte oder weiter entfernte Zelle handeln. Eine technische Umsetzung zur Ermittlung des Departure-Points wird in [116] beschrieben.

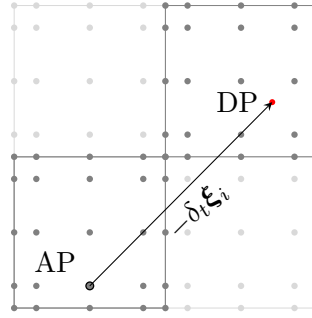
Im eigentlichen Strömungsschritt wird der interpolierte Verteilungsfunktionswert dann der ursprünglichen Stützstelle zugewiesen, der als Arrival-Point (AP)  $\mathbf{x}_{\text{AP}}$  bezeichnet wird

$$\hat{f}_{i\Xi j}(\mathbf{x}_{\text{AP}}, t) = f_i(\mathbf{x}_{\text{AP}} - \delta_t \xi_i, t - \delta_t) = \sum_{j=1}^{N_j} \hat{f}_{i\Xi' j}(t) \psi_{\Xi' j}(\mathbf{x}_{\text{AP}} - \delta_t \xi_i). \quad (3.4)$$

Im Endeffekt lässt sich der Strömungsschritt als eine dünnbesetzte Matrix-Vektor-Multiplikation pro diskreter Geschwindigkeit  $i \in \{0, 1, \dots, Q-1\}$  ausdrücken

$$\mathbf{f}_i = \Psi_i \mathbf{f}_i^{\text{PC}}. \quad (3.5)$$





**Abbildung 3.2:** Schematische Darstellung zur Ermittlung des Departure-Points (DP) ausgehend vom Arrival-Point (AP), der gleichzeitig Stützstelle in der jeweiligen Zelle ist. Die Charakteristiken werden über die Zellgrenzen hinweg verfolgt bis die Strecke  $|\delta_t \xi_i|$  zurückgelegt ist.

wobei  $f_i^{\text{pc}}$  die Verteilungsfunktion nach Ausführung des Kollisionsoperators  $\Omega_i$  meint. Der Kollisionsschritt wird auf den Stützstellen mit den dort vorliegenden Verteilungsfunktionswerten durchgeführt. Insgesamt ergibt sich dadurch eine leicht abgewandelte Variante von Gleichung (2.51) als SLLBM-Gleichung mit BGK-Kollisionsoperator

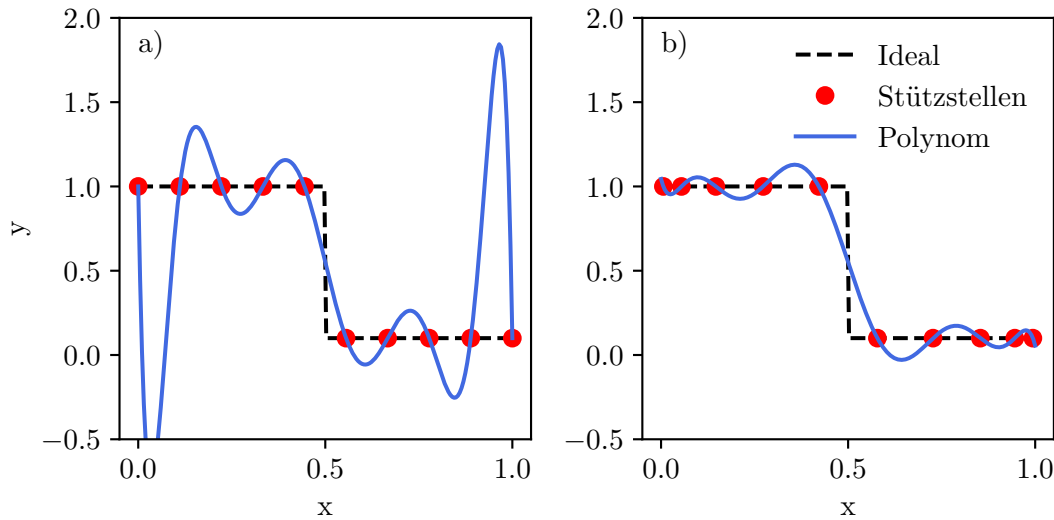
$$f_i(x, t) = f_i(\mathbf{x} - \delta_t \xi_i, t - \delta_t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x} - \delta_t \xi_i, t - \delta_t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \delta_t \xi_i, t - \delta_t)]. \quad (3.6)$$

Der Semi-Lagrangesche Strömungsschritt entkoppelt Orts-, Zeit- und Geschwindigkeitsdiskretisierung der Lattice-Boltzmann-Methode. Wird die SLLBM mit den etablierten Geschwindigkeitssätze D2Q9, D3Q19 oder D3Q27 aus Abschnitt 2.3.2 in Verbindung mit unverzerrten kartesischen Gittern und  $\delta_t = 1$  verwendet, dann wird als Spezialfall der ursprüngliche Algorithmus der Lattice-Boltzmann-Gleichung mit exakter knotenweiser Advektion zurückgewonnen. Wird jedoch eine abweichende Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums vorgenommen oder allgemein im Fall  $\delta_t \neq 1$ , so liegt der Punkt  $x - \delta_t \xi_i$  regelmäßig abseits des Gitters und die Interpolation kommt zum Tragen.

Zur Interpolation der Verteilungsfunktion eines Departure-Points werden die  $N_j = (p + 1)^D$  Stützstellen der jeweiligen umschließenden Zelle herangezogen, wobei  $p$  den polynomiellen Grad der Ansatzfunktionen bezeichnet. Innerhalb jeder Zelle können die Stützstellen der Ansatzfunktionen prinzipiell beliebig angeordnet werden, wobei diese Arbeit vor allem zwischen äquidistanten und Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen unterscheidet. Für eine Dimension sind letztere folgendermaßen definiert

$$x_k = \frac{1}{2} \left[ 1 - \cos \left( \frac{k-1}{p-1} \pi \right) \right], \quad k = 1, 2, \dots, p. \quad (3.7)$$

Die bei kompressiblen Strömungen regelmäßig auftretenden Diskontinuitäten der makroskopischen Größen stellen die Löser hoher Ordnung regelmäßig vor Probleme [213].

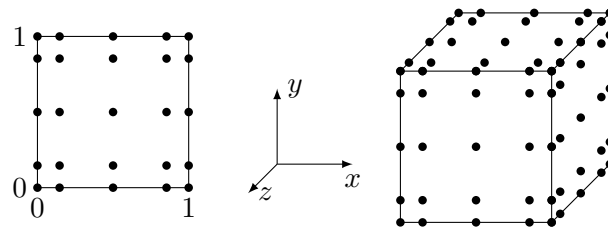


**Abbildung 3.3:** Lagrange-Polynome des Grades  $p = 9$  mit äquidistanten a) und Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen b). Die Diskontinuität befindet sich an der Stelle  $x = 0.5$

Zur Verdeutlichung des Problems bei der Interpolation, zeigt Abb. 3.3 exemplarisch Lagrange-Polynome neunten Grades  $p = 9$  mit äquidistanten und mit Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen zur Approximation einer Diskontinuität. Es ist zu erkennen, dass die Überschwinger bei Verwendung nicht-äquidistanter Stützstellen effektiv vermindert werden können. Zusammen mit dem zellularen Ansatz ist dies ein Alleinstellungsmerkmal der SLLBM im Vergleich zu den bisherigen interpolationsbasierten LBM.

Mittels einer Stabilitätsanalyse des Advektionsoperators konnten Krämer et al. zeigen, dass der Advektionsschritt mit Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen bis zur Ordnung  $p \leq 3$  immer stabil ist und dass die Stabilität für  $p = 4$  nicht bedeutsam eingeschränkt ist, wohingegen äquidistante Konfigurationen für  $p > 2$  regelmäßig instabil sind [114]. Abb. 3.4 zeigt jeweils eine zwei- und dreidimensionale Referenzzelle vierter Ordnung mit Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen, wie sie in dieser Arbeit meist zum Einsatz kamen.

Die Verwendung der SLLBM bietet allerhand Vorteile. Zunächst erhöht die Interpolation hoher Ordnung auch die räumliche Konvergenzordnung des Verfahrens [116]. Diese Option moderner Löser [214] fehlt der LBM in ihrer Ursprungsform gänzlich. Außerdem ist der Zeitschritt der SLLBM variabel wählbar, was sowohl sehr kleine als auch sehr große Zeitschritte im Vergleich zur LBM ermöglicht. Durch die Suche des DP über mehrere Zellgrenzen hinweg, gibt es keine Zeitschrittrestriktion in Bezug auf die Advektion, welche ansonsten, gemäß der CFL-Bedingung nach Courant-Friedrichs-Lewy [45], die Zeitschrittweite expliziter Zeitintegrationsverfah-



**Abbildung 3.4:** Zwei- (links) bzw. dreidimensionale Referenzzellen (rechts) der Ordnung  $p = 4$  mit Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen. Die innenliegenden Stützstellen sind der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt.

ren begrenzt. Die CFL-Bedingung lautet

$$c \frac{\delta_t}{\delta_x} < \text{CFL}_{\max}, \quad (3.8)$$

wobei  $c$  eine charakteristische Geschwindigkeit beschreibt, die bei Navier-Stokes-Lösern meist die Strömungsgeschwindigkeit oder die Schallgeschwindigkeit ist, während  $c$  bei Boltzmann-Lösern der größten diskreten Geschwindigkeit des Geschwindigkeitssatzes entspricht, die einem Vielfachen der Schallgeschwindigkeit entsprechen kann. Da  $\text{CFL}_{\max}$  letztlich vom Zeitintegrationsverfahren abhängt, muss die Zeitschrittweite zwangsweise an die kleinste Gitterweite angepasst werden, was insbesondere die Simulation mit körperangepassten Gittern in ihrer Performanz begrenzt. Die SLLBM umgeht dieses Problem elegant, wie es z.B. in Krämer et al. [114] oder Wilde et al. demonstriert wurde [221].

Zuletzt weicht die SLLBM die strengen Anforderungen der LBM an das Gitter und die Geschwindigkeitsdiskretisierung auf. Somit werden einerseits verzerrte und unstrukturierte Gitter ermöglicht, andererseits öffnen sich neue Möglichkeiten durch ungewöhnliche Geschwindigkeitssätze, die potentiell die Genauigkeit des Verfahrens und den Rechenaufwand verbessern. Der letztgenannte Aspekt ist ein wesentlicher Teil der vorliegenden Arbeit und wird in Kapitel 4 detailliert beschrieben.

Nachteilig für die SLLBM ist die Volatilität der Gesamtmasse in der Simulationsdomäne, die jedoch durch Verwendung von Interpolationspolynomen hoher Ordnung weitgehend minimiert werden kann [220]. Auch die bei interpolationsbasierten Lösern oftmals kritisierte numerische Diffusion kann durch Interpolation hoher Ordnung stark verringert werden. Außerdem erhöht die SLLBM den Rechenaufwand des Strömungsschritts, da für die Interpolation einer diskreten Verteilungsfunktion  $(p + 1)^D$  Stützstellen der umschließenden Zelle einzubeziehen sind.

Die SLLBM wurde von Di Ilio et al. an einer dreidimensionalen Zylinderumströmung mit  $\text{Re} = 3900$  untersucht und konnte insbesondere durch die Verwendung körperangepasster Gitter überzeugen [52]. Wie die vorliegende Arbeit deutlich macht, zeigt sich das Potenzial der SLLBM jedoch vor allem in kompressiblen Strömungen, bei

denen die LBM mit dem üblichen Strömungsschritt gravierende Nachteile in Bezug auf die Stabilität aufweist. Diese Nachteile können Off-Lattice-Boltzmann-Methoden und insbesondere die SLLBM überwinden, was in Kapitel 5 gezeigt werden wird.

Parallel zu der vorliegenden Arbeit entwickelten Saadat et al. ebenfalls eine zweidimensionale kompressible SLLBM [176] für unstrukturierte Gitter. Dabei benutzten die Autoren den D2Q9-Geschwindigkeitssatz, der bei hohen Machzahlen bekanntermaßen Fehler im Spannungstensor aufweist. Um diese zu beheben nutzten sie die Ableitungen der Ansatzfunktionen zur Berechnung von Korrekturtermen. Die Methode wurde anhand der Umströmung eines NACA-0012 Tragflächenprofils validiert, weist im Gegensatz zur in dieser Arbeit entwickelten Methode allerdings nur zweite räumliche Ordnung auf und wurde bisher nicht auf drei Dimensionen erweitert.

Eine ausführliche Diskussion der SLLBM im Vergleich zu anderen kompressiblen Methoden findet sich in Abschnitt 6.2.

Die technische Realisierung der SLLBM für kompressible Strömungen dieser Arbeit stellt eine Erweiterung des Softwarepakets *NATrium* dar [116], welches auf dem Finite-Elemente-Paket *Deal.II* [8] aufbaut.

### 3.3.1 Polynomielle Gleichgewichtsverteilung vierter Ordnung

Die betrachtete kompressible SLLBM bedient sich des diskreten Gleichgewichts, welches in Abschnitt 2.3.1 erläutert wurde

$$f_i^{\text{eq},N}(\mathbf{x}, t) = w_i \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \mathbf{a}_{\text{eq}}^{(n)}(\mathbf{x}, t) : \mathcal{H}_i^{(n)}. \quad (3.9)$$

Die Expansionsordnung beträgt in allen Testfällen dieser Arbeit, sofern nicht anders angegeben,  $N = 4$ . Dies ermöglicht, die Physik kompressibler Simulationen mit Reibungs- und Wärmeleitungseffekten korrekt wiederzugeben [182].

### 3.3.2 Variabler Isentropenexponent

Wie bereits in Kapitel 2 beschrieben, ist die Boltzmann-Gleichung nicht imstande, die Gesamtenergie mehratomiger Gase zu beschreiben. Aus diesem Grund wurde durch Rykov bereits in den 1970er Jahren vorgeschlagen, diesen Umstand mit einer zweiten Partikelverteilungsfunktion  $g$  zu beheben, welche den Anteil der inneren Energie durch Rotation und Vibration der Moleküle beschreibt [174]. Diese Idee wurde von Nie et al. für die LBM mit diskreten Geschwindigkeitsverteilungen  $g_i$  aufgegriffen [155] und mehrfach in nachfolgenden Arbeiten verwendet [30, 67, 130]. Bei diesem Ansatz bleibt die SLLBM-Gleichung im Grunde unverändert

$$h_i(x, t) = h_i(x - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t) - \frac{1}{\tau} [h_i(x - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t) - h_i^{\text{eq}}(x - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t)], \quad (3.10)$$

wobei  $h_i \in \{f_i, g_i\}$ . Günstigerweise kann man bei Verwendung des identischen Geschwindigkeitssatzes für  $g_i$  die diskrete Gleichgewichtsfunktion unmittelbar aus

$$g_i^{\text{eq}} = T(2C_v - D)f_i^{\text{eq}}, \quad (3.11)$$

berechnen, was den Rechenaufwand deutlich reduziert. Außerdem ermittelt sich die Gesamtenergie abweichend zu Gl. (2.42) als

$$2\rho C_v T = \sum_{i=0}^{Q-1} (|\boldsymbol{\xi}_i|^2 f_i + g_i) = \sum_{i=0}^{Q-1} (|\boldsymbol{\xi}_i|^2 f_i^{\text{eq}} + g_i^{\text{eq}}), \quad (3.12)$$

während sich Dichte und Impuls weiterhin mit den Gleichungen (2.41) errechnen. Nachteilig an diesem Ansatz ist der zusätzliche Speicher- und Rechenaufwand für die Verteilungsfunktion  $g_i$ , jedoch entspricht dieser Ansatz dem gegenwärtigen Stand der Technik.

### 3.3.3 Variable Prandtlzahl

Obwohl die Temperaturänderung durch Advektion bei kompressiblen Strömungen meist die Wärmeleitungseffekte überragen, ist eine einstellbare Prandtlzahl ebenso wünschenswert. Die Wärmeleitung wird dabei durch die zentralen dritten Momente beschrieben

$$\bar{Q}_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{i=0}^{Q-1} (\xi_{i\alpha} - u_\alpha)(\xi_{i\beta} - u_\beta)(\xi_{i\gamma} - u_\gamma) f_i, \quad (3.13)$$

$$\bar{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{\text{eq}} = \sum_{i=0}^{Q-1} (\xi_{i\alpha} - u_\alpha)(\xi_{i\beta} - u_\beta)(\xi_{i\gamma} - u_\gamma) f_i^{\text{eq}}, \quad (3.14)$$

welche sich durch die Verwendung der Relativgeschwindigkeiten  $\boldsymbol{\xi}_i - \mathbf{u}$  vom Wärmeflussensor in Gl. (2.11) unterscheiden. Diese Momente müssen nun mit einer der Prandtlzahl angepassten Relaxationsrate  $\tau_{\text{Pr}} = (\tau - 0.5)/\text{Pr} + 0.5$  relaxiert werden im Gegensatz zu den Momenten zweiter Ordnung

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} f_i \quad (3.15)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} f_i^{\text{eq}}, \quad (3.16)$$

die den Einträgen der Spannungstensoren entsprechen und weiterhin mit  $\tau$  relaxiert werden. Am einfachsten lässt sich dies mit einem Two-Relaxation-Time-Modell (TRT) erreichen, welches in der Literatur auch als Quasi-Equilibrium LBM bezeichnet wird [5]. Dadurch ergibt sich folgende abgewandelte SLLBM-Gleichung

$$h_i(\mathbf{x}, t) - h_i(\mathbf{x} - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t) = -\frac{1}{\tau} [h_i(\mathbf{x} - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t) - h_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t)] + \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1}{\tau_{\text{Pr}}} \right) h_i^*(\mathbf{x} - \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t - \delta_t), \quad (3.17)$$

mit dem Ausdruck des Quasi-Gleichgewichts

$$f_i^* = w_i(\bar{Q}_{\alpha\beta\gamma} - \bar{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{\text{eq}}) : \mathcal{H}_{i\alpha\beta\gamma}^{(3)} / c_s^3 \quad (3.18)$$

und

$$g_i^* = w_i \left( \sum_{\alpha=0}^{Q-1} (\xi_{i\alpha} - u_\alpha)(g_i - g_i^{\text{eq}}) \right) : \mathcal{H}_{i\alpha}^{(1)} / c_s. \quad (3.19)$$

Der schematische Ablauf der kompressiblen SLLBM-Simulation ist abschließend in Abb. 3.5 zusammengefasst.

### 3.3.4 Chapman-Enskog-Analyse der SLLBM

Mithilfe einer Mehrskalenganalyse kann gezeigt werden, dass die SLLBM-Gleichungen für kompressible Strömungen (3.17) die kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in Gl. (2.1) bis (2.3) approximieren. Die detaillierte Vorgehensweise ist in Anhang A dargestellt.

### 3.3.5 Fehleranalyse der kompressiblen SLLBM

Im Gegensatz zum in Abschnitt 2.5 dargelegten Gesamtfehler der Standard-LBM existiert bei der vorgeschlagenen SLLBM für kompressible Strömungen kein Machzahl-abhängiger Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  in der Impulsgleichung.

Lässt man den Interpolationsfehler außer Acht, so ergibt für die vorgeschlagene Methode ein Gesamtfehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\delta_x^p + \delta_t^2)$ . Bei Einbeziehung des Interpolationsfehlers ergibt sich dagegen [116]

$$\mathcal{O} \left( \min \left( \frac{\delta_x^{p+1}}{\delta_t}, \delta_x^p \right) + \delta_t^2 \right). \quad (3.20)$$

Konkret bedeutet eine Verkleinerung des Zeitschritts  $\delta_t$  also, dass der Interpolationsfehler  $\delta_x^{p+1}/\delta_t$  zunächst ansteigt, allerdings geschieht dies nicht in beliebigem Ausmaß, denn für sehr kleine Zeitschritte liegt die zu interpolierende Verteilungsfunktion nahe an den Stützstellen. Dieser Umstand verhindert ein unbegrenztes Anwachsen des Fehlers. Um diese Fehlerbetrachtung numerisch zu untermauern, werden die Fehler in Abschnitt 5.1 mithilfe konkreter Simulationen analysiert.

## 3.4 Randbedingungen der Semi-Lagrangeschen LBM

Ein wesentlicher Aspekt zur Simulation kompressibler Simulationen ist die Einbindung geeigneter Randbedingungen. Während periodische Randbedingungen leicht

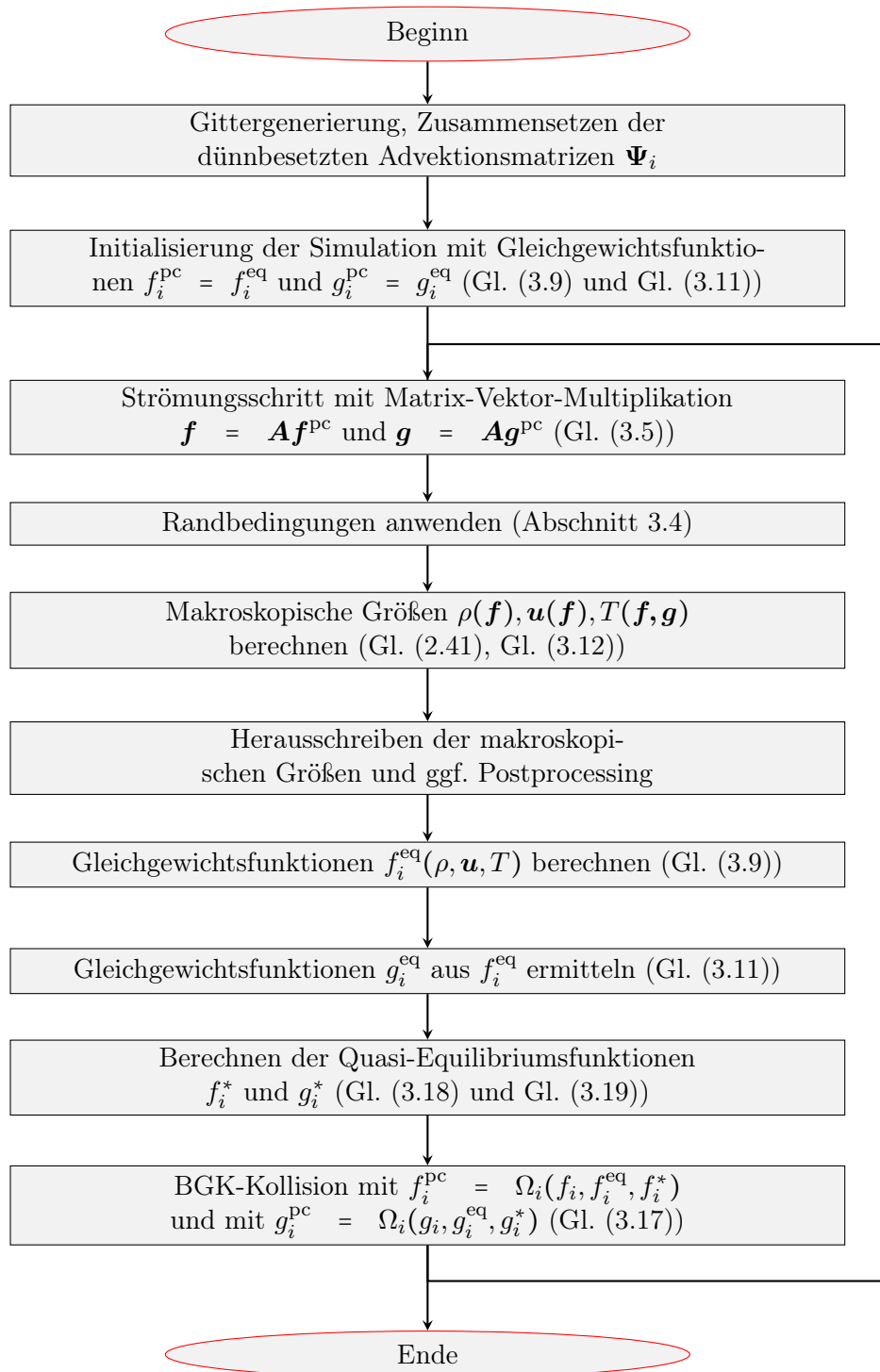


Abbildung 3.5: Schematischer Ablauf der Simulation mit der SLLBM.

umgesetzt werden können, muss der Algorithmus zur Ermittlung der Departure-Points (DP) mit detektierten Randbedingungen umgehen können. Im Folgenden wird, von periodischen Rändern abgesehen, auf drei Randbedingungen eingegangen:

- i) Gleichgewichtsrandbedingungen
- ii) Bounce-Back-Randbedingungen
- iii) Auslassrandbedingungen

### 3.4.1 Gleichgewichtsrandbedingungen

Gleichgewichtsrandbedingungen sind vergleichsweise leicht umzusetzen, werden als außerordentlich stabil erachtet [121] und eignen sich vor allem als Einlassrandbedingung. Tritt bei der Ermittlung des DP eine Wanddetektion auf, so wird die Verteilungsfunktion des AP mit der Gleichgewichtsfunktion ermittelt, wodurch Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur an der Wand vorgegeben werden können, d.h.

$$f_i(\mathbf{x}_{AP}, t) = f_i^{\text{eq}}(\rho_w, \mathbf{u}_w, T_w). \quad (3.21)$$

Gleichgewichtsrandbedingungen werden oft kritisiert, da sie unterstellen, dass sich die Strömung im Gleichgewicht befindet, also keine Reibung und keine Wärmeleitung vorliegt. Während dies bei Strömungen mit niedrigen Machzahlen zu Fehlern führen kann, so ergeben sich bei supersonischen Einlassrändern praktisch keine Probleme, da sich der Einflussbereich der makroskopischen Größen stromabwärts befindet.

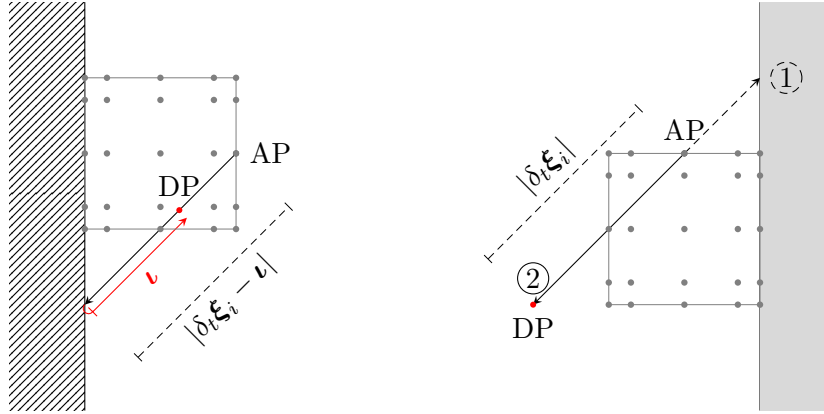
### 3.4.2 Bounce-Back-Randbedingungen

Durch Bounce-Back-Randbedingungen können adiabate Festkörperländer mit Haftbedingung in der SLLBM realisiert werden [113], wobei sich die Grundidee an der Standard-LBM orientiert [69, 76]. Die SLLBM-Bounce-Back-Randbedingung kann jedoch ebenso als Weiterentwicklung der interpolationsbasierten Bounce-Back-Randbedingung verstanden werden [20], welche – bei Beibehaltung des regulären Gitters – insbesondere bei gekrümmten Rändern zur Verbesserung der Genauigkeit zum Einsatz kommt.

Da die SLLBM körperangepasste Gitter verwenden kann, versprechen Bounce-Back-Randbedingungen mit der SLLBM eine hohe Genauigkeit. Zur Umsetzung wird die Suche des Departure-Points in entgegengesetzter Richtung fortgesetzt, sobald eine Wand detektiert wird. Bei der Ermittlung der Verteilungsfunktion am Ort  $\mathbf{x}_{DP}$  wird dann die im Geschwindigkeitsraum entgegengesetzte Verteilungsfunktion  $f_i = f(-\xi_i)$  verwendet. Somit ergibt sich für einen Zeitschritt

$$f_i(\mathbf{x}_{AP}, t) = f_i(\mathbf{x}_{DP}, t - \delta_t) \quad (3.22)$$





**Abbildung 3.6: Links:** Darstellung der Bounce-Back-Randbedingung zur Ermittlung des Departure-Points (DP) von einem beliebigen Arrival-Point (AP) aus. Hierzu wird zunächst die Distanz  $\boldsymbol{\xi}_i \delta_t - \boldsymbol{\nu}$  zurückgelegt, die Restdistanz  $|\boldsymbol{\nu}|$  wird dann in entgegengesetzter Richtung verfolgt.

**Rechts:** Darstellung der Auslassrandbedingung. Zunächst wird detektiert, dass in der ursprünglichen Richtung der Charakteristiken eine Auslassrandbedingung liegt. Im Anschluss wird die Suche des DP vom AP in entgegengesetzter Richtung fortgesetzt bis die Distanz  $\boldsymbol{\xi}_i \delta_t$  zurückgelegt ist.

und

$$\mathbf{x}_{\text{DP}} = \mathbf{x}_{\text{W}} + \boldsymbol{\nu}, \quad \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{\xi}_i \delta_t - (\mathbf{x}_{\text{AP}} - \mathbf{x}_{\text{W}}). \quad (3.23)$$

Die Konstruktion des DP bei Bounce-Back-Randbedingungen ist auf der linken Seite von Abb. 3.6 dargestellt.

Soll am Rand zusätzlich eine Temperatur  $T_w$  vorgegeben werden, wie es in der supersonischen Kanalströmung in Abschnitt 5.4.4 der Fall ist, so kann dies über eine Modifikation der Verteilungsfunktionen geschehen, nachdem eine der Verteilungsfunktionswerte mit der Wand kollidiert sind. Hierbei findet eine Modifikation aller  $Q$  Verteilungsfunktionswerte am jeweiligen Gitterpunkt in Wandnähe statt und die Temperatur am AP wird auf die Temperatur der Wand  $T_w$  reduziert.

$$f_i(\mathbf{x}_{\text{AP}}, t) = f_i(\mathbf{x}_{\text{DP}}, t - \delta_t) + f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T_w) - f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T(\mathbf{x}_{\text{AP}})). \quad (3.24)$$

Für die Dichte  $\rho$  und die Geschwindigkeiten  $\mathbf{u}$  in Gl. (3.24) werden hier die Werte des Arrival-Points herangezogen. Durch diese Modifikation bleiben einerseits die konservativen Größen der Dichte und Geschwindigkeit erhalten. Im Vergleich zu Gleichgewichtsrandbedingungen bleiben aber auch alle Schermomente erhalten, wenn die Temperaturrandbedingung mit einer Bounce-Back-Randbedingung kombiniert wird.

### 3.4.3 Auslassrandbedingungen

Zur Realisierung der Anströmung von Objekten werden zuletzt Auslassrandbedingungen benötigt. Hierzu eignen sich Randbedingungen, bei denen der Gradient der Verteilungsfunktionen am Rand verschwindet. Wird bei der Ermittlung des DP eine Auslassrandbedingung erkannt, so wird die Suche des DP ausgehend vom AP neu in entgegengesetzter Richtung begonnen, bis die Strecke  $\xi_i \delta_t$  zurückgelegt ist, also

$$f_i(\mathbf{x}_{AP}, t) = f_i(\mathbf{x}_{AP} + \xi_i \delta_t, t - \delta_t). \quad (3.25)$$

Die Vorgehensweise ist abschließend auf der rechten Seite von Abb. 3.6 dargestellt.

## 3.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde zunächst der Stand der Technik kompressibler LBM dargestellt. Anschließend wurde Schritt für Schritt die SLLBM für kompressible Simulationen erläutert, welche für die Simulationen in der vorliegenden Arbeit entwickelt wurde. Auf die Vor- und Nachteile dieses Ansatzes wird zu einem späteren Zeitpunkt in Abschnitt 6.2 eingegangen. Ein wesentlicher Aspekt der kompressiblen SLLBM wurde allerdings bisher ausgespart: Die Geschwindigkeitsdiskretisierung. Weil letztere für die Stabilität, Genauigkeit und Performanz der Methode von zentraler Bedeutung ist, widmet sich das kommende Kapitel der Frage, wie neuartige, kompakte Geschwindigkeitssätze für die SLLBM gewonnen werden können und wie diese sich von der Geschwindigkeitsdiskretisierung von On-Lattice-Boltzmann-Verfahren unterscheiden.

# 4 Effiziente Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums

---

«*Nous sommes serviteurs plutôt que maîtres en mathématiques.*»

– Charles Hermite

Die geschickte Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums ist ein guter Ansatzpunkt zur Reduzierung des Rechenaufwands für die SLLBM-Simulation, da die Anzahl der zu lösenden Advektionsgleichungen proportional mit den diskreten Geschwindigkeiten  $Q$  ansteigt. Während das Einsparpotential von On-Lattice-Boltzmann-Simulationen durch die Restriktion des kartesischen Gitters weitgehend ausgeschöpft sind, ist die Freiheit der Geschwindigkeitsdiskretisierung ein wesentlicher Vorteil der Off-Lattice-Boltzmann-Verfahren. Wie aus Abschnitt 2.3.2 hervorgeht, nimmt die Standard-LBM durch die üblichen Geschwindigkeitssätze D2Q9, D3Q15, D3Q19 und D3Q27 machzahlabhängige Fehler in Kauf, um ein effizientes numerisches Schema zu erhalten, das sich allerdings nur zur Simulation schwach kompressibler Strömungen eignet. Dagegen sind Off-Lattice-Boltzmann-Verfahren wie die SLLBM für Geschwindigkeitssätze mit nicht-äquidistanten Stützstellen geeignet, die mit einem hinreichend hohen Quadraturgrad die machzahlabhängigen Fehler verschwinden lassen und sich somit für kompressible Strömungen eignen. Wie einleitend in Kapitel 2.3.2 erläutert, werden die Momente der Lattice-Boltzmann-Methode mittels einer Quadratur approximiert (vgl. Gl. (2.39))

$$\mathbf{a}^{(n)} = \int_{\mathbb{R}^D} \omega(\boldsymbol{\xi}) \frac{f}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \mathcal{H}^{(n)} d\boldsymbol{\xi} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i \mathcal{H}_i^{(n)}. \quad (4.1)$$

Aus Abschnitt 2.3.2 geht hervor, dass Simulationen hoher Machzahlen und kompressibler Strömungen einen hohen Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \geq 8$  erfordern, wenn die Verteilungsfunktionen auf die Hermite-Polynome projiziert werden. Ziel dieses Kapitels ist die Identifizierung geeigneter Geschwindigkeitssätze zur Simulation kompressibler Simulationen. Die neu gewonnenen Geschwindigkeitssätze werden anhand der Symmetriebedingungen auf ihre Tauglichkeit zur Simulation geprüft. Zum Schluss des

Kapitels wird zur Abgrenzung und zum Vergleich die Geschwindigkeitsdiskretisierung verdünnter Strömungen mit alternativen Boltzmann-Verfahren erläutert.

## 4.1 Numerische Quadraturen hohen Grades

Zunächst werden in diesem Abschnitt allgemein eindimensionale Quadraturregeln mit  $D = 1$  betrachtet. In diesem Fall kommen zur numerischen Integration im relevanten Bereich  $-\infty$  bis  $\infty$  grundsätzlich zwei Quadraturmethoden in Betracht: Gauß-Hermite- und Newton-Cotes-Quadraturen. Bei letzteren werden die Stützstellen äquidistant im Integrationsgebiet verteilt, sodass mit  $n$  Stützstellen ein Quadraturgrad von  $\mathfrak{N} \leq n - 1$  erreicht wird. Im Gegensatz dazu werden die Stützstellen bei Gauß-Hermite-Quadraturen frei im Integrationsgebiet angeordnet, sodass im Grenzfall der Grad  $\mathfrak{N} \leq 2n - 1$  erreicht werden kann.

### 4.1.1 Newton-Cotes-Quadratur

Das Integral einer Funktion  $\hat{P} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $x \rightarrow \hat{P}(x)$  in den Grenzen  $a$  bis  $b$  kann durch das Integral eines Interpolationspolynoms  $L(x)$  des Grades  $n$  approximiert werden

$$\int_a^b \hat{P}(x) dx \approx \int_a^b L(x) dx. \quad (4.2)$$

Wenn der Grad von  $\hat{P}(x)$  nun  $\deg(\hat{P}(x)) \leq \deg(L(x))$  ist, dann approximiert  $L(x)$  die Funktion  $\hat{P}(x)$  in den Grenzen  $a$  und  $b$  exakt und kann durch eine Summe von  $n$  gewichteten Stützstellen  $x_i$  ausgedrückt werden

$$\int_a^b \hat{P}(x) dx = \sum_{i=1}^n w_i \hat{P}(x_i), \quad (4.3)$$

wobei sich die Gewichte  $w_i$  aus den Lagrangeschen Basispolynomen der Stützstellen  $x_i$  ergeben [11].

### 4.1.2 Gauß-Hermite-Quadratur

Sei  $\hat{\omega}(x) = \exp(-x^2)$  eine Gewichtsfunktion und  $\mathcal{F}(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \rightarrow \mathcal{F}(x)$  eine zu integrierende Funktion vom Grad  $2n - 1$  und gesucht ist das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) \mathcal{F}(x) dx, \quad (4.4)$$

dann kann die Funktion  $\mathcal{F}(x)$  auch mithilfe des Produkts eines  $n$ -ten Hermite-Polynom  $\mathcal{H}(x)$  vom Grad  $n$  und einer Funktion  $Q(x)$  vom Grad  $n - 1$  ausgedrückt

werden. Somit ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) \mathcal{F}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) Q(x) \mathcal{H}(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) R(x) dx, \quad (4.5)$$

wobei  $R(x)$  ein Restglied vom Grad  $n - 1$  bezeichnet. Da  $\mathcal{H}(x)$  per Definition orthogonal zu Polynomen niedrigeren Grades und somit auch zu  $Q(x)$  ist, gilt  $\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) Q(x) \mathcal{H}(x) dx = 0$  und damit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) \mathcal{F}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) R(x) dx. \quad (4.6)$$

Somit ist es ausreichend, das Restglied  $R(x)$  zu integrieren. Weil  $R(x)$  ein Polynom  $(n - 1)$ -ten Grades ist, sind zur Integration von  $\mathcal{F}(x)$  lediglich  $n$  geschickt gewählte Stützstellen ausreichend, die als Nullstellen des  $n$ -ten Hermite-Polynome identifiziert werden. Durch diese Wahl wird die Bedingung  $\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\omega}(x) Q(x) \mathcal{H}(x) dx = \sum_{i=1}^n \hat{w}_i Q(x_i) \mathcal{H}(x_i) = 0$  auch im Fall der diskreten Formulierung mit den Gewichten  $\hat{w}_i$  erfüllt. In diesem Fall gilt

$$\sum_{i=1}^n \hat{w}_i \mathcal{F}(x_i) = \sum_{i=1}^n \hat{w}_i R(x_i). \quad (4.7)$$

Die Gauß-Hermite-Quadratur erreicht durch Integration des Restglieds einen gewünschten Quadraturgrad also mit weniger Stützstellen als die Newton-Cotes-Quadratur. Ein weiterer Vorteil der Gauß-Hermite-Quadratur ist, dass die gefundenen Gewichte  $\hat{w}_i$  stets positiv sind, während bei Newton-Cotes-Quadraturen hoher Ordnung auch negative Gewichte auftreten können, was zu Instabilitäten führen kann [11]. Die Gewichte der Gauß-Hermite-Quadratur errechnen sich zu

$$w_i = \frac{n!}{(n \mathcal{H}^{(n-1)}(x_i))^2}. \quad (4.8)$$

Gauß-Hermite-Quadraturen sind ausschließlich in Verbindung mit der Gewichtsfunktion  $\hat{\omega}(x)$  definiert sind, wodurch die Integration in  $\mathbb{R}$  stattfindet, während die Newton-Cotes-Quadratur in definierten, endlichen Grenzen durchgeführt wird.

Tabelle 4.1 fasst die Nullstellen und Gewichte der Gauß-Hermite-Quadraturen mit den Graden  $\mathfrak{N} = 5, 7, 9$  zusammen. Aus den angegebenen Abszissen und Gewichten können sofort die Geschwindigkeitssätze D1Q3, D1Q5 sowie D1Q7 abgeleitet werden. Da der D1Q3-Geschwindigkeitssatz in der Regel auf kartesischen Gittern verwendet wird, ist eine Skalierung der Quadraturvorschrift mit  $1/\sqrt{3}$  notwendig. Bei D1Q5 und D1Q7 ist dagegen – wie bereits erwähnt – keine Skalierung auf kartesische Gitter möglich. Mit Off-Lattice-Boltzmann-Methoden wie der SLLBM können jedoch auch diese Geschwindigkeitssätze verwendet werden.

Aufgrund der hohen Effizienz bei wenig Stützstellen sind Gauß-Hermite-Quadraturen unbestritten das Mittel der Wahl zur Ableitung von LBM-Geschwindigkeitssätzen bei

**Tabelle 4.1:** Abszissen und Gewichte der eindimensionalen Gauß-Hermite-Quadratur fünften, siebten und neunten Grades [182].

Grad $\mathfrak{N}$	$i$	$\xi_i$	$w_i$
5	0	0	$2/3$
	1, 3	$\pm\sqrt{3}$	$1/6$
7	0, 2	$\pm\sqrt{3 - \sqrt{6}}$	$(3 + \sqrt{6})/12$
	1, 3	$\pm\sqrt{3 + \sqrt{6}}$	$(3 - \sqrt{6})/12$
9	0	0	$8/15$
	1, 3	$\pm\sqrt{5 - \sqrt{10}}$	$(7 + 2\sqrt{10})/60$
	2, 4	$\pm\sqrt{5 + \sqrt{10}}$	$(7 - 2\sqrt{10})/60$

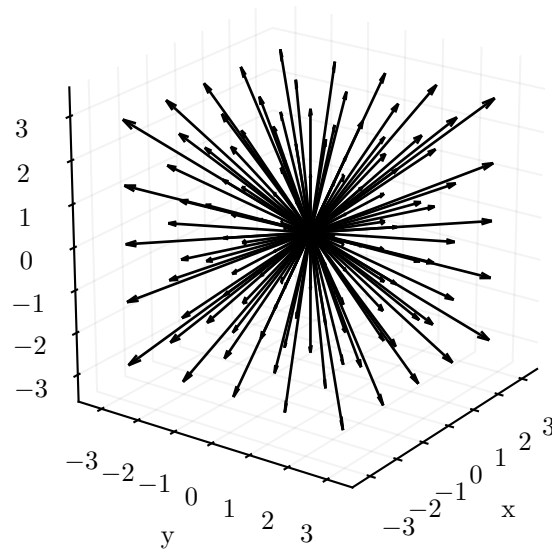
der Anwendung im Kontinuumsbereich, weswegen sie für die kompressiblen Simulationen dieser Arbeit zunächst weiter betrachtet werden. Zum Abschluss des Kapitels wird in Abschnitt 4.3 noch ein weiterführender Blick auf die Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums bei verdünnten Strömungen geworfen, bei denen sowohl Gauß-Hermite- als auch Newton-Cotes-Quadraturen verwendet werden. Im nun kommenden Abschnitt werden die eindimensionalen Quadraturen zunächst auf mehrere Dimensionen erweitert.

## 4.2 Multivariate Quadraturen

Zur Lösung relevanter technischer Probleme mit der Boltzmann-Gleichung ist die Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums vor allem in zwei oder drei Dimensionen notwendig. Für die Herleitung multivariater Quadraturregeln existieren die grundlegend verschiedenen Möglichkeiten der Produktregel und der Kubaturregeln.

### 4.2.1 Produktregel

Die Herleitung von mehrdimensionalen Quadraturen mit der Produktregel ist die deutlich einfachere umzusetzende Variante, mit der eine eindimensionale Quadraturregel auf höhere Dimensionen projiziert wird. Für die Standard-LBM ist dies das zugrundeliegende Verfahren zur Herleitung der zwei- und dreidimensionalen Geschwindigkeitssätze, da diese ebenso auf das kartesische Gitter skaliert werden können, wenn dies beim zugehörigen eindimensionalen Geschwindigkeitssatz auch möglich ist [121]. So können aus dem D1Q3 mit  $\mathfrak{N} = 5$  die Geschwindigkeitssätze D2Q9 und D3Q27 mit gleichem  $\mathfrak{N}$  erzeugt werden. Die Partikelgeschwindigkeiten in zwei Dimensionen ergeben sich durch eine paarweise Kombination aller D1Q3-Partikelgeschwindigkeiten; die dritte Dimension ergibt sich durch eine weitere Wiederholung dieses Vorgangs. Für die Gewichte gilt dabei  $w_{ab} = w_a w_b$  in 2D bzw.  $w_{abc} = w_a w_b w_c$  in 3D.



**Abbildung 4.1:** D3Q125-Geschwindigkeitssatz, welcher mittels Produktregel aus einem D1Q5 mit  $\mathfrak{N} = 9$  hergeleitet wurde.

Der zentrale Nachteil dieser Herangehensweise ist der „Fluch der Dimensionalität“, welcher den überproportionalen Anstieg der mehrdimensionalen Stützstellen mit  $n^D$  beschreibt [41]. Diese Beschränkung fällt insbesondere bei kompressiblen LBM-Simulationen ins Gewicht, da hier ein Quadraturgrad von  $\mathfrak{N} \geq 8$  benötigt wird. Prinzipiell ergibt sich bei  $D = 1$  und den Nullstellen des Hermite-Polynoms fünfter Ordnung der D1Q5-Geschwindigkeitssatz  $\mathfrak{N} = 9$ , woraus sich die Geschwindigkeitssätze D2Q25 und ein D3Q125 (Abb. 4.1) herleiten lassen, die allerdings nicht mehr auf ein regelmäßiges Gitter gestreckt werden können. Insbesondere der letztgenannte, dreidimensionale Geschwindigkeitssatz D3Q125 ist für tatsächliche Simulationen aufgrund seiner Größe allerdings unbedeutend, da effizientere Sätze gefunden werden können, wie im weiteren Verlauf des Kapitels dargelegt wird. Bei höherdimensionalen Geschwindigkeitssätzen existiert mit dem symmetrischen Trimmen der Quadraturen eine Möglichkeit, um die Anzahl der Abszissen zu reduzieren. Hierzu wird ausgenutzt, dass die der Produktregel entsprungenen Geschwindigkeitssätze meist auch mit weniger Abszissen den gewünschten Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$  erreichen [121]. Im Falle des D3Q27 führt dies zu D3Q15 oder D3Q19 [121]; anstelle D3Q125 kann ein D3Q77 erzeugt werden, welcher für Simulationen mit DUGKS verwendet wurde [30, 217], s. Abschnitt 3.2.

### 4.2.2 Kubaturregeln

Alternativ zur simplen, aber teuren Produktregel lassen sich Stützstellen und Gewichte so im Raum anordnen, dass einerseits der Grad der numerischen Integration gewahrt wird, gleichzeitig aber die Anzahl der Stützstellen im Vergleich zur Produktregel stark verringert werden kann. Multivariate Quadraturregeln, die nicht mit der Produktregel abgeleitet sind, werden Kubaturregeln genannt (engl. *Cubature rules*) [39].

Ähnlich zum eindimensionalen Fall werden Kubaturen eingesetzt, um das Integral der gewichteten Funktion  $\mathcal{F}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}, \mathbf{x} \rightarrow \mathcal{F}(\mathbf{x})$  zu approximieren [220]

$$I(\mathcal{F}) = \int_{\Omega} \omega(\mathbf{x}) \mathcal{F}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4.9)$$

mit  $\Omega \subset \mathbb{R}^D$ , der mehrdimensionalen Gewichtsfunktion  $\omega(\mathbf{x}) \geq 0$  und Dimension  $D \geq 2$ . Die Kubatur hat dann die Form

$$\mathcal{C}(\mathcal{F}) = \sum_{i=0}^{Q-1} w_i \mathcal{F}(\mathbf{x}_i), \quad (4.10)$$

wobei auch hier  $w_i$  die diskreten Gewichte bezeichnet.

Der Grad einer Quadratur ist als die größte ganze Zahl  $\mathfrak{N}$  definiert, für die  $I(\mathcal{F}) = \mathcal{C}(\mathcal{F})$  ergibt, bei Berücksichtigung aller Monome

$$\prod_{i=0}^{D-1} x_i^{j_i} \quad \text{mit} \quad \sum_{i=0}^{D-1} j_i \leq \mathfrak{N} \quad (4.11)$$

vom Grad  $\mathfrak{N}$ .

Stroud gab eine untere Grenze von Quadraturpunkten für eine bestimmte Dimension  $D$  und Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$  an [193]

$$Q \geq \binom{\lfloor \mathfrak{N}/2 + D \rfloor}{\lfloor \mathfrak{N}/2 \rfloor}, \quad (4.12)$$

die mit einer späteren Verfeinerung dieser Formel von Möller für ungerade Quadraturgrade übereinstimmt [150]. Die nach dieser Formel ermittelte Anzahl an Abszissen ist für relevante Quadraturgrade und Dimensionen in Tabelle 4.2 aufgeführt. Allerdings handelt es sich bei der Grenze um einen theoretischen Wert, der nur selten von tatsächlich gelisteten Kubaturen erreicht wird. Daher wird in Tabelle 4.2 zum Vergleich in Klammern die Anzahl der Abszissen von tatsächlich gefundenen Kubaturen aufgeführt.



**Tabelle 4.2:** Minimale Anzahl an Stützstellen für gegebenen Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$  und Dimension  $D$  gem. Gl. 4.12 nach Stroud [193]. In Klammern: Anzahl an Stützstellen für tatsächlich gefundene Kubaturen mit Quadraturgrad  $\mathfrak{N}$  und Dimension  $D$  gem. der Enzyklopädie von Cools [40].

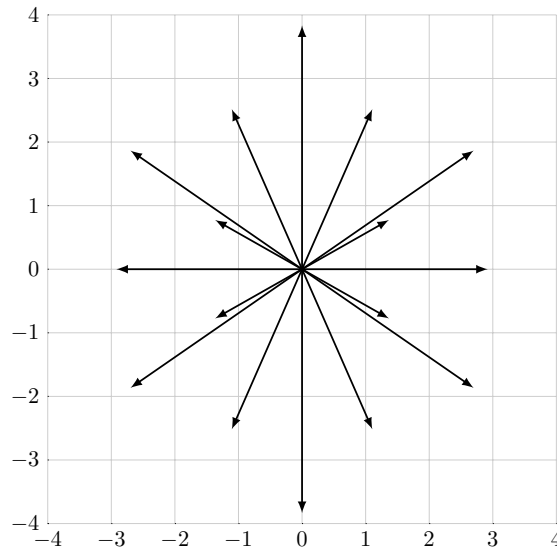
Dimension $D$	$\mathfrak{N} = 5$	$\mathfrak{N} = 7$	$\mathfrak{N} = 9$	$\mathfrak{N} = 11$
2	6 (7)	10 (12)	15 (18)	21 (25)
3	10 (13)	20 (27)	35 (45)	56 (77)

In der Literatur finden sich eine Reihe von Sammlungen mit Kubaturregeln [40, 194], sowie numerische Softwarepakete, wie z.B. *quadpy* [178]. Aus diesen Sammlungen können nun unmittelbar Off-Lattice-Geschwindigkeitssätze abgeleitet werden, welche in Tabelle 4.3 gelistet sind. Für den Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 5$  stehen mit D3Q13 und D3Q21 gleich zwei alternative Off-Lattice-Geschwindigkeitssätze zur Verfügung, während für den Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 7$  mit dem D3V27-Geschwindigkeitssatz ein Gegenstück zum On-Lattice-Geschwindigkeitssatz D3Q27 mit  $\mathfrak{N} = 5$  mit gleicher Abszissenanzahl existiert.

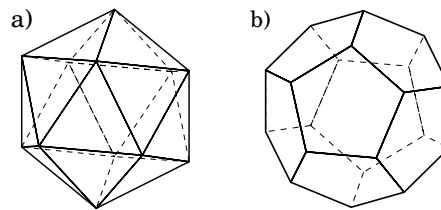
Die beiden Geschwindigkeitssätze D2Q19 und D3Q45 besitzen außerdem die wenigsten Abszissen in zwei bzw. drei Dimensionen für den Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$  und wurden für Lattice-Boltzmann-Simulationen bisher nicht verwendet. Der D2Q19-Geschwindigkeitssatz ist in Abb. 4.2 dargestellt. In zwei Dimensionen ergibt sich im Vergleich zu D2Q25 mit  $\mathfrak{N} = 9$  eine Reduzierung des Rechenaufwands von ca. 24 Prozent und in drei Dimensionen verglichen zu D3Q125 mit  $\mathfrak{N} = 9$  eine Reduzierung um ca. 65 Prozent. Selbst gegenüber dem D3Q77-Geschwindigkeitssatz in den Arbeiten [30, 217] mit DUGKS reduziert sich die Anzahl der Abszissen noch um ca. 42 Prozent.

In vielen Fällen ist die Anordnung der Abszissen dieser Sätze nicht vollkommen willkürlich, sondern sie folgt den Regelmäßigkeiten platonischer Körper, wie beim D3Q13-Geschwindigkeitssatz mit  $\mathfrak{N} = 5$  in Form der Ecken eines Ikosaeders (Abb. 4.3a) oder wie beim D3Q21-Geschwindigkeitssatz, welcher aus den Ecken eines Dodekaeders abgeleitet wird (s. Abb. 4.3b) [218]. Auch beim D3Q45 handelt es sich um die Kombination zweier Ikosaeder mit einem Dodekaeder, deren Ecken auf drei verschiedenen Radien angeordnet werden. Die diskreten Geschwindigkeiten besitzen somit drei verschiedene Energieniveaus. Der Geschwindigkeitssatz ist in Abb. 4.4 dargestellt. Es ist offensichtlich, dass die gezeigten Geschwindigkeitssätze in On-Lattice-Simulationen mit kartesischen Gittern nicht verwendet werden können.

Simulationen mit allen in Tabelle 4.3 gelisteten Geschwindigkeitssätzen finden sich in Kapitel 5.



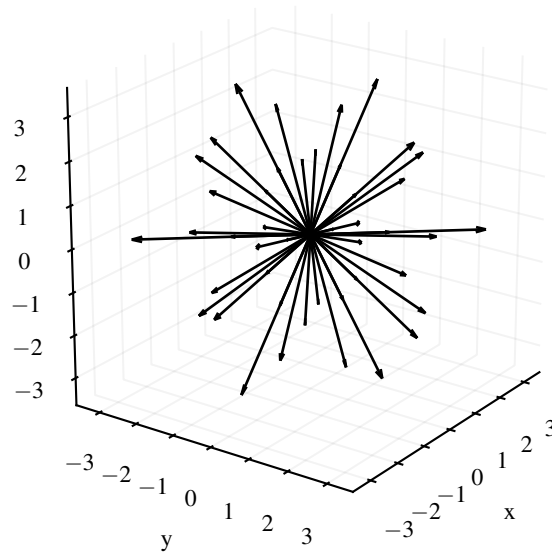
**Abbildung 4.2:** Darstellung des neu eingeführten Geschwindigkeitssatzes D2Q19 mit Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$ . Aus [218].



**Abbildung 4.3:** Struktur von Ikosaeder a) und Dodekaeder b) als Schablone für die Geschwindigkeitssätze D3Q13 und D3Q21. Aus [218].

**Tabelle 4.3:** Auflistung der kubatur-basierten Off-Lattice Geschwindigkeitssätze, die in dieser Arbeit verwendet wurden. Die Abszissen und Gewichte sind in Anhang B gelistet. Die Schreibweise  $E_{D,\mathfrak{N}}^Q$  ist in der Literatur gebräuchlich.

Name	Quadraturgrad	$E_{D,\mathfrak{N}}^Q$	Quelle
D2Q19	$\mathfrak{N} = 9$	$E_{2,9}^{19}$	[85]
D3Q13	$\mathfrak{N} = 5$	$E_{3,5}^{13}$	[194, 204]
D3Q21	$\mathfrak{N} = 5$	$E_{3,5}^{21}$	[194]
D3V27	$\mathfrak{N} = 7$	$E_{3,7}^{27}$	[194]
D3Q45	$\mathfrak{N} = 9$	$E_{3,9}^{45}$	[112, 210]



**Abbildung 4.4:** Darstellung des neu eingeführten Geschwindigkeitssatzes D3Q45 mit Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$ . Aus [221].

### 4.2.3 Geschwindigkeitsdiskretisierungen für On-Lattice-Boltzmann-Methoden

Als Spezialfall der Kubaturen können On-Lattice-Boltzmann-Geschwindigkeitssätze hoher Ordnung betrachtet werden, deren Abszissen regelmäßige Abstände ausweisen müssen und damit ebenso multivariaten Newton-Cotes-Quadraturen ähneln. Es gibt in der LBM-Literatur verschiedene Ansätze, um On-Lattice-Geschwindigkeitssätze zu konstruieren, allerdings verfolgen sämtliche Ansätze das Ziel, die höheren Momente der Maxwell-Boltzmann-Verteilung bis zu einer bestimmten Ordnung exakt zu bestimmen. Die Tauglichkeit der Geschwindigkeitssätze zu diesem Zweck kann bspw. mit den Symmetriebedingungen überprüft werden, auf die in Abschnitt 4.2.4 eingegangen wird.

Ansätze zur Konstruktion von On-Lattice-Geschwindigkeitssätzen hohen Grades wurden bspw. von Chikatarmala und Karlin [34, 35] entwickelt, die bei der Konstruktion als Ziel eine Minimierung des Fehlers in den höheren Momenten in Bezug auf die Maxwell-Boltzmann-Verteilung verfolgten. Die hieraus entwickelten eindimensionalen Geschwindigkeitssätze wurden dann per Produktregel in höhere Dimensionen übertragen. Dieses Prinzip adaptierten Frapoli et al. bei der Simulationen kompressibler Strömungen mit einem D3Q343-Geschwindigkeitssatz, der auf einem D1Q7 mit den Geschwindigkeiten  $\xi \in \{0, \pm 1, \pm 2, \pm 3\}$  unter Verwendung der Produktregel beruht [67]. Im Gegensatz dazu sind die von Shan entwickelten Geschwindigkeitssätze nicht der

**Tabelle 4.4:** Auflistung relevanter On-Lattice-Boltzmann-Geschwindigkeitssätze mit  $\mathfrak{N} \geq 7$ 

Bezeichnung	Grad der Quadratur	Quelle
D2V17	$\mathfrak{N} = 7$	[162, 182]
D2V37	$\mathfrak{N} = 9$	[162]
D2Q49	$\mathfrak{N} = 9$	[162]
D3Q39	$\mathfrak{N} = 7$	[64, 130, 182]
D3Q103	$\mathfrak{N} = 9$	[180]
D3V107	$\mathfrak{N} = 9$	[203]
D3Q343	$\mathfrak{N} = 9$	[67]

Produktregel entsprungen, sondern die Abszissen können beliebig im Raum verteilt sein, sofern die Abszisse auf einem benachbarten Gitterpunkt endet und die Bedingung

$$\sum_{i=0}^{Q-1} w_i \mathcal{H}^{(n)}(\xi_i) = 0, \quad \forall 0 < n \leq \mathfrak{N} \quad (4.13)$$

erfüllt ist [179], was bedeutet, dass die Geschwindigkeitssätze anhand der Hermite-Polynome n-ter Ordnung entwickelt werden. Auf diese Weise konnte Shan die Geschwindigkeitssätze D2V17 und D3Q39 mit  $\mathfrak{N} = 7$ , sowie D2V37 und D3Q103 mit  $\mathfrak{N} = 9$  bestimmen. Surmas et al. fanden darüber hinaus einen D3V107-Geschwindigkeitssatz, der ebenso den Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$  erfüllt.

Zuletzt präsentierten Spiller und Dünweg eine gründlich durchgeführte Studie zu On-Lattice-Geschwindigkeitssätzen [192]. Zu diesem Zweck entwickelten sie einen Algorithmus, der systematisch Geschwindigkeitssätze eines gewünschten Quadraturgrads sucht und die Abszissen und Gewichte ermittelt. In ihrer Arbeit bestätigten die Autoren die bereits gefundenen Geschwindigkeitssätze von Shan et al. und Surmas et al. [203], was anzeigt, dass das Optimum bei On-Lattice-Geschwindigkeitssätzen bis Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \leq 9$  wahrscheinlich bereits gefunden wurde. Verglichen mit den Off-Lattice-Geschwindigkeitssätzen des vorherigen Abschnitts, sind die dreidimensionalen On-Lattice-Geschwindigkeitssätze für  $\mathfrak{N} = 9$  bezogen auf die Anzahl der Abszissen mehr als doppelt so groß. In Kapitel 6 werden die Geschwindigkeitssätze D3Q103 und D3V107 mit einem On-Lattice-Boltzmann-Löser anhand eines kompressiblen, dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbels getestet werden.

## 4.2.4 Test der Symmetriebedingungen

Um zu testen, ob die aus Quadraturregeln abgeleiteten Geschwindigkeitssätze tatsächlich zur Simulation mit der LBM geeignet sind, können die Symmetriebedingungen

herangezogen werden, die bis zur achten Ordnung folgendermaßen lauten [218]

$$\begin{aligned}
\sum_i w_i &= 1 & (4.14) \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} &= 0 \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} &= 0 \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} &= c_s^4 \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} &= 0 \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} \xi_{i\zeta} &= c_s^6 \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} \xi_{i\zeta} \xi_{i\eta} &= 0 \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} \xi_{i\zeta} \xi_{i\eta} \xi_{i\theta} &= c_s^8 \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta\eta\theta} \\
\sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} \xi_{i\zeta} \xi_{i\eta} \xi_{i\theta} \xi_{i\iota} &= 0,
\end{aligned}$$

mit den Substitutionen

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma},$$

sowie

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} = \delta_{\alpha\beta} \Delta_{\gamma\delta\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\gamma} \Delta_{\beta\delta\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\delta} \Delta_{\beta\gamma\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\epsilon} \Delta_{\beta\gamma\delta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta} \Delta_{\beta\gamma\delta\epsilon},$$

und

$$\begin{aligned}
\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta\eta\theta} &= \delta_{\alpha\beta} \Delta_{\gamma\delta\epsilon\zeta\eta\theta} + \delta_{\alpha\gamma} \Delta_{\beta\delta\epsilon\zeta\eta\theta} + \delta_{\alpha\delta} \Delta_{\beta\gamma\epsilon\zeta\eta\theta} + \delta_{\alpha\epsilon} \Delta_{\beta\gamma\delta\zeta\eta\theta} \\
&\quad + \delta_{\alpha\zeta} \Delta_{\beta\gamma\delta\epsilon\eta\theta} + \delta_{\alpha\eta} \Delta_{\beta\gamma\delta\epsilon\zeta\theta} + \delta_{\alpha\theta} \Delta_{\beta\gamma\delta\epsilon\zeta\eta}.
\end{aligned}$$

Bis zur fünften Ordnung reproduzieren alle in dieser Arbeit verwendeten Geschwindigkeitssätze die korrekten, durch diese Symmetriebedingungen vorgegebenen Koeffizienten. Wendet man die dreidimensionalen Geschwindigkeitssätze D3Q15, D3Q19 und D3Q27 mit  $\mathfrak{N} = 5$  allerdings auf die Symmetriebedingungen sechster Ordnung an, so weisen alle drei Geschwindigkeitssätze erwartungsgemäß einen Fehler für

$$\Theta_{\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha} = \sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} \xi_{i\alpha} / c_s^6 = 9 \quad (4.15)$$

mit  $\alpha \in \{x, y, z\}$  auf. Der korrekte Wert dagegen beträgt  $\bar{\Theta}_{\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha} = 15$ . Diese Abweichung steht in engem Zusammenhang mit dem machzahlabhängigen Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(\text{Ma}^3)$  der Standard-LBM.

**Tabelle 4.5:** Exemplarische Einträge des Tensors  $\Theta_\Gamma := \Theta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} = \sum_i w_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} \xi_{i\delta} \xi_{i\epsilon} \xi_{i\zeta} / c_s^6$  für die Geschwindigkeitssätze mit  $\mathfrak{N} = 5$  im Vergleich zum theoretischen Wert  $\bar{\Theta}_\Gamma$  und dem D3V27 mit  $\mathfrak{N} = 7$ .

$\Gamma$	$\bar{\Theta}_\Gamma$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3Q15}}$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3Q19}}$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3Q27}}$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3Q13}}$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3Q21}}$	$\Theta_\Gamma^{\text{D3V27}}$
x x x x x x	15	9	9	9	10	11.11	15
x x y y z z	1	3	0	1	0	1.111	1
x x x x y y	3	3	3	3	1.382	2.566	3
x x x x z z	3	3	3	3	3.618	1.323	3

Neben diesem Defekt existiert ein weiterer Fehler für D3Q15 und D3Q19, denn hier ergibt  $\Theta_{xyyyzz} = 3$  für D3Q15 und  $\Theta_{xyyyzz} = 0$  für D3Q19, wohingegen mit D3Q27 der korrekte Wert  $\Theta_{xyyyzz} = 1$  ermittelt wird. Diese Abweichung gilt ebenso für die 89 weiteren Tensoreinträge, welche durch Permutationen dieser Indizes ermittelt werden können. Der Defekt von D3Q27 beschränkt sich somit auf nur drei der insgesamt 729 Tensoreinträge, wohingegen bei D3Q15 und D3Q19 insgesamt 93 Einträge betroffen sind. Es ist zu erwarten, dass der kubische machzahlabhängige Fehler in diesem Fall noch bedeutender ist. Dies könnte aus Sicht der Symmetriebedingungen erklären, weshalb viele Autoren – trotz des höheren Speicher- und Rechenbedarfs – auf D3Q27 zur Simulation turbulenter Strömung zurückgreifen. Dies ist bspw. bei Bösch et al. [18] oder Geier et al. [74] der Fall, während D3Q15 praktisch nicht zur Berechnung turbulenter Strömungen eingesetzt wird.

Für die beiden Geschwindigkeitssätze D3Q13 und D3Q21 ergeben sich für die Tensoreinträge sechster Ordnung sogar noch größere Abweichungen, denn für diese Geschwindigkeitssätze sind alle 193 Nicht-Null-Tensoreinträge betroffen, wenngleich die Übereinstimmung der  $\Theta_{\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha\alpha}$ -Einträge im Vergleich zu D3Q19 und D3Q27 verbessert ist. Exemplarisch sind einige Tensoreinträge für die Geschwindigkeitssätze mit  $\mathfrak{N} = 5$  und  $\mathfrak{N} = 7$  in Tabelle 4.5 dargestellt. Erwartungsgemäß reproduziert der Geschwindigkeitssatz D3V27 mit  $\mathfrak{N} = 7$  die Werte der Symmetrietensoren bis einschließlich sechster Ordnung.

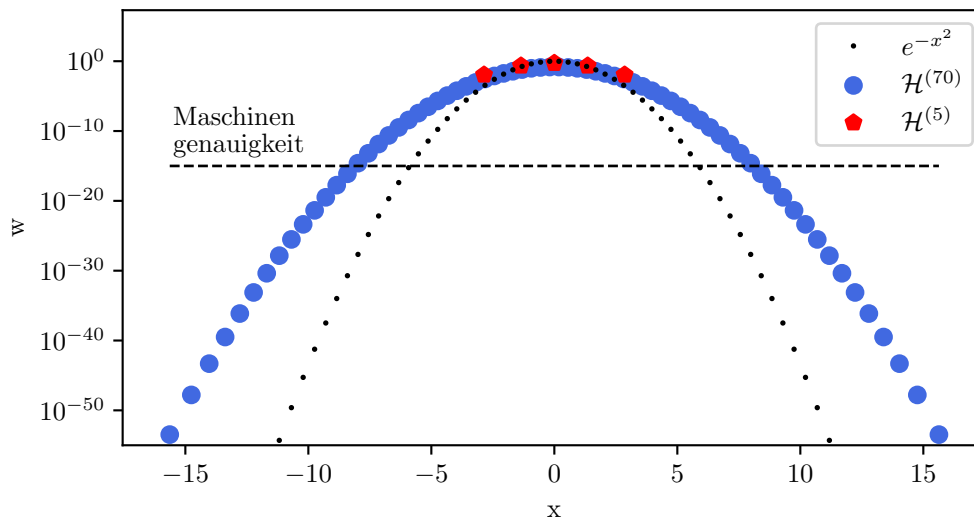
Die beiden Kubatur-basierten Geschwindigkeitssätze D2Q19 und D3Q45 mit  $\mathfrak{N} = 9$  erfüllten im Test die Anforderungen an alle gelisteten Symmetriebedingungen. Gleiches gilt für die aus der Produktregel hergeleiteten Geschwindigkeitssätze gleichen Quadraturgrads D2Q25, D3Q77 sowie D3Q125. Diese Geschwindigkeitssätze sind somit zur Simulation kompressibler Strömungen mit der SLLBM geeignet.

## 4.3 Boltzmann-Verfahren hoher Ordnung für verdünnte Strömungen

In den vorherigen Abschnitten wurden die Möglichkeiten zur Geschwindigkeitsdiskretisierung der LBM untersucht. Während zur Simulation von Kontinuumsströmungen mit der LBM in der Regel Gauß-Hermite-Quadraturen bzw. Kubaturen mit Quadraturgrad  $\mathfrak{N} \leq 9$  zur Ableitung der Geschwindigkeitssätze verwendet werden, sind summierte Newton-Cotes-Formeln niedriger Ordnung bei Simulationen verdünnter Gase, d.h. für Strömungen mit einer Knudsenzahl  $\geq \mathcal{O}(0.01)$ , mit der DUGKS oder DVM stark verbreitet. Es stellt sich die Frage, weshalb nicht bevorzugt die exakten Gauß-Hermite-Quadraturen zum Einsatz kommen, um die Anzahl der Abszissen zu reduzieren. Der folgende Abschnitt dient der Beantwortung dieser Fragestellung.

Kontinuumsströmungen weisen grundsätzlich nur geringe Abweichungen vom Gleichgewicht auf, wohingegen sich verdünnte Strömungen mit hohen Knudsenzahlen durch große Abweichungen vom Gleichgewicht auszeichnen. Um dieser Eigenschaft der verdünnten Strömungen Rechnung zu tragen, müssen die Gleichungen der Quadratur (4.2) bzw. (4.4) mit einer hohen Genauigkeit approximiert werden. Außerdem verzichtet die DVM aufgrund des großen Nichtgleichgewichts auf die Projektion der Verteilungsfunktionen der Boltzmann-Gleichung auf Hermite-Polynome wie in Abschnitt 2.3.1 dargelegt, da auch die Momente hoher Ordnung für die Exaktheit des Verfahrens von Bedeutung sind und nicht vernachlässigt werden können [7]. Dies führt dazu, dass der polynomielle Grad der zu approximierenden Funktion unbekannt ist, der Geschwindigkeitsraum aber dennoch bestmöglich approximiert werden soll. Quadraturen hoher Ordnung wären zwar prinzipiell geeignet, um die Anzahl der Abszissen klein zu halten, allerdings eignen sich Newton-Cotes-Verfahren hoher Ordnung kaum, da sie unter dem Runge-Phänomen durch Oszillationen des Interpolationspolynoms leiden [101]. Deshalb werden zur Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums bei der DVM meist summierte Newton-Cotes-Regeln niedriger Ordnung eingesetzt [226]. Dazu wird der Integrationsbereich in Abschnitte unterteilt, jeder dieser Teilstücke jeweils mit einer Newton-Cotes-Regel niedriger Ordnung integriert und anschließend summiert [228]. Aufgrund der niedrigen Ordnung müssen jedoch zur Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums eine sehr große Anzahl Stützstellen eingesetzt werden.

Alternativ kann die Integration des Geschwindigkeitsraums zwar auch mit Gauß-Hermite-Quadraturen mit beliebig hoher Ordnung erfolgen [211], allerdings stellten diverse Arbeiten bei der Simulation verdünnter Strömungen Abweichungen bei der Verwendung der Gauß-Hermite-Quadratur im Vergleich zu Referenzlösungen fest, die bspw. mit der DSMC gewonnen wurden. Shi et al. [184] verglich eindimensionale Quadraturen mit bis zu 37 Abszissen in Form von Newton-Cotes- als auch Gauß-Hermite-Quadraturen zur Simulation verdünnter Strömungen, wobei letztere mithilfe einer Finite-Volumen-Methode eingesetzt wurden, während die Newton-Cotes-Quadratur mit einem On-Lattice-Strömungsschritt durchgeführt wurde. Als ein Grund für die



**Abbildung 4.5:** Gewichte der Gauß-Hermite-Quadratur mit fünf sowie siebzig Stützstellen.

Abweichungen wird die Eigenart der Gauß-Hermite-Quadraturen genannt, dass sie bei einer sehr großen Ordnung und Anzahl an Stützstellen verschwindend kleine Gewichte aufweisen [71, 206]. Diesen Umstand zeigt Abb. 4.5. Außerdem erklärten sich Shi et al. die Abweichungen dadurch, dass Gauß-Quadraturen grundsätzlich eher die Randbereiche des Integrationsbereichs betonen, sodass der relativ bedeutende Bereich niedriger Partikelgeschwindigkeiten selbst bei hohen Quadraturgraden nur unzureichend von Abszissen abgedeckt wird [184]. Aus Abb. 4.5 geht außerdem hervor, dass die Gewichtsfunktion  $\hat{w}(x) = \exp(-x^2)$  nur in einem begrenzten Bereich größer als die Maschinengenauigkeit ist, weswegen summierte Newton-Cotes-Verfahren ihren Integrationsbereich deutlich kleiner wählen.

Beispielsweise wird der Geschwindigkeitsraum in einer Arbeit von Guo et al. [84] lediglich im Bereich  $[-4\sqrt{2RT}, 4\sqrt{2RT}]$  diskretisiert, also bis zu etwa dem Vierfachen der wahrscheinlichsten Partikelgeschwindigkeit  $\sqrt{2RT}$ . Zur Diskretisierung kamen dabei zur zweidimensionalen Berechnung von verdünnten Gasen bis zur Knudsenzahl von  $\text{Kn} \leq 8$  insgesamt  $[100 \times 100]$  diskrete Geschwindigkeiten zum Einsatz, also ein Vielfaches der notwendigen Anzahl von Abszissen im Kontinuumsbereich. Aufgrund dieser enormen Anzahl diskreter Geschwindigkeiten sind die Simulationen meist auf zwei Dimensionen beschränkt. Eine Möglichkeit zur Reduzierung der diskreten Geschwindigkeit sind adaptive Geschwindigkeitsräume, wie sie von Chen et al. für DUGKS demonstriert wurden [29].

Der Vergleich mit anderen Verfahren der Boltzmann-Gleichung wie der DVM oder der DUGKS und den extrem großen Geschwindigkeitssätzen führt die Effizienz der der Lattice-Boltzmann-Methode im Kontinuumsbereich vor Augen: Die Projektion



der Boltzmann-Gleichung auf Hermite-Polynome und die kleinen Abweichungen vom Gleichgewicht erlauben es, dass die relevanten makroskopischen Größen und Momente wie Dichte, Impuls und Energie, sowie Stresstensor und Wärmeflusstensor, durch Polynome niedriger, begrenzter Ordnung beschrieben werden. Hierdurch ist es ausreichend, dass die Quadratur ebenfalls einen relativ geringen Quadraturgrad aufweisen kann, um diese konservativen Größen *exakt* zu integrieren. Fehler in den Momenten zweiter Ordnung werden bei der Standard-LBM durch die Verwendung kleiner Machzahlen tolerierbar, für größere Machzahlen kann dieses Problem durch eine höhere Quadraturordnung gelöst werden.

## 4.4 Zusammenfassung

Dieses Kapitel ging auf die grundlegenden Methoden zur Diskretisierung des Geschwindigkeitsraum für Verfahren auf Basis der Boltzmann-Gleichung ein. Für die Standard-LBM sind hier vor allem eindimensionale Gauß-Hermite-Quadraturen von Bedeutung, die mit der Produktregel auf zwei und drei Dimensionen projiziert werden, was bei niedrigen Quadraturgraden günstig für die Verwendung von kartesischen Gittern ist. Off-Lattice-Boltzmann-Methoden profitieren dagegen von einer großen Freiheit der Diskretisierung des Geschwindigkeitsraum, weswegen aus Kubaturregeln neue Geschwindigkeitssätze hervorgebracht werden konnten, die nun im nachfolgenden Kapitel in SLLBM-Simulationen zum Einsatz gebracht werden.



# 5 Simulationen kompressibler Strömungen

---

*“Give me six hours to chop down a tree and I will spend the first four sharpening the axe.”*

– Abraham Lincoln

In den beiden vorherigen Kapiteln wurden einerseits die kompressible SLLBM detailliert beschrieben und andererseits angepasste, schlanke Geschwindigkeitssätze entwickelt. In diesem Kapitel wird die Methode nun validiert und zur Simulation ein-, zwei- und dreidimensionaler Strömungen im schwach kompressiblen sowie kompressiblen Regime eingesetzt. Zur Validierung wird eine bewegte Dichteschwankung, ein bewegter zweidimensionaler Taylor-Green-Wirbel und ein Test des Temperaturbereichs der Methode herangezogen. Hierauf folgen eindimensionale und zweidimensionale Riemannprobleme, um die Fähigkeit der Methode zur Darstellung von Stößen zu beurteilen. Dem schließen sich eine Stoß-Wirbel-Interaktion, eine supersonische Umströmung eines NACA-0012-Tragflächenprofils sowie eine detaillierte Untersuchung des kompressiblen, dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbels mit verschiedenen Reynoldszahlen an. Zuletzt werden eine trans- und supersonische Kugelanströmung sowie eine supersonische Kanalströmung simuliert.

## 5.1 Validierung

### 5.1.1 Bewegte Dichteschwankung

Als ein erster, einfacher Testfall wird eine zweidimensionale Dichteschwankung betrachtet, die horizontal durch eine zweidimensionale Simulationsdomäne bewegt wird [219]. Die zeitabhängigen Lösungen für Dichte, Geschwindigkeiten und Druck lau-

**Tabelle 5.1:** Numerischer Fehler der bewegten Dichteschwankung. Aus [219].

Gitterpunkte	Fehler $\ \rho - \rho_{ref}\ _\infty$	Ordnung
$16 \times 16$	$2.10599 \cdot 10^{-2}$	
$32 \times 32$	$1.32533 \cdot 10^{-3}$	4.0
$64 \times 64$	$5.36948 \cdot 10^{-5}$	4.6
$128 \times 128$	$4.68312 \cdot 10^{-6}$	3.5
$256 \times 256$	$7.90318 \cdot 10^{-7}$	2.6
$512 \times 512$	$2.14017 \cdot 10^{-7}$	1.9

ten [176]

$$\rho(x, y, t) = 1 + 0.2 \sin(\pi(x - u_x t)) \sin(\pi y) \quad (5.1)$$

$$u_x(x, y, t) = 1 \quad (5.2)$$

$$u_y(x, y, t) = 0, \quad (5.3)$$

$$P(x, y, t) = 1. \quad (5.4)$$

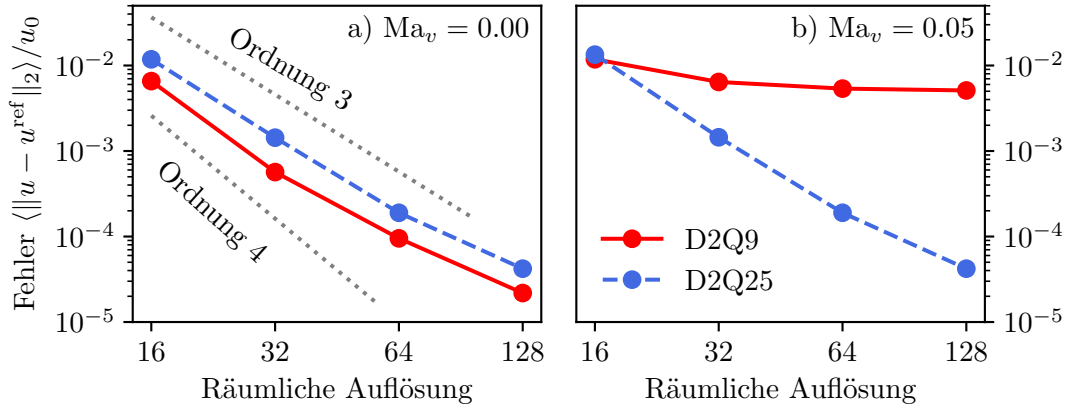
Die Domäne mit periodischen Rändern ist als  $x, y \in [-1, 1]$  definiert. Für das größte Gitter von  $16 \times 16$  Gitterpunkten, aufgeteilt in  $N_\Xi = 4$  Zellen mit Ordnung der Ansatzfunktionen  $p = 4$ , wurde die Simulationsendzeit  $t = 2$  in 1105 Schritten erreicht. Die Anzahl der Schritte verdoppelte sich für jede feinere Simulation. Die kinematische Viskosität wurde mit  $\nu = 10^{-10}$  eingestellt und die Machzahl betrug  $Ma = 0.2$  [219].

In Tabelle 5.1 sind die numerischen Fehler der Dichte für die Auflösungen  $16^2$  bis  $256^2$  dargestellt. Bei groben Auflösungen nahmen die numerischen Fehler mit etwa vierter Größenordnung ab, was der räumlichen Konvergenzordnung entspricht. Bei feineren Simulationen überwiegt dann der zeitliche Fehler zweiter Ordnung [219].

### 5.1.2 Test der Galileischen Invarianz

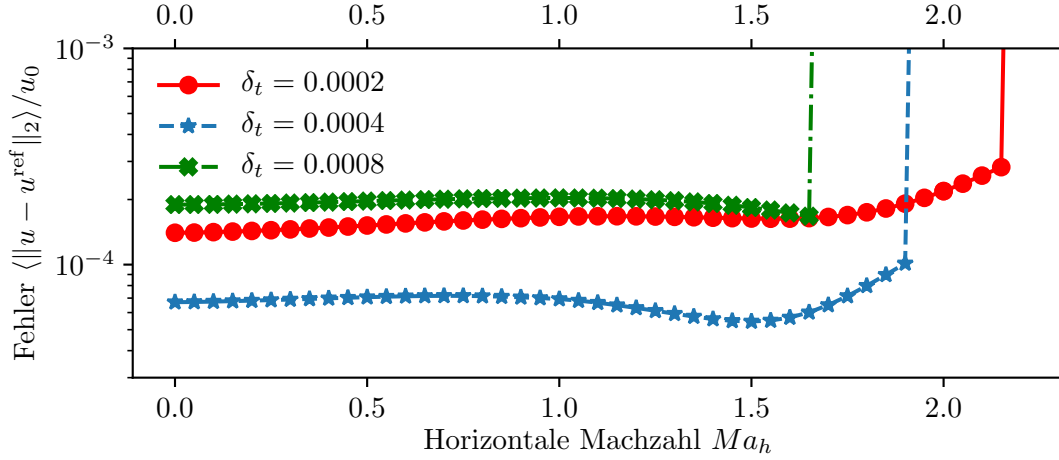
Die Lattice-Boltzmann-Methode verfügt in ihrer Standardformulierung aufgrund des  $Ma^3$ -Fehlerterms aus Abschnitt 2.5 nur über unzureichende Galileische Invarianz. Der bewegte zweidimensionale Taylor-Green-Wirbel ist daher ein guter Testfall, um dieses Problem für die SLLBM zu untersuchen, da er über eine analytische Lösung verfügt. Die Initialbedingungen des Testfalls auf dem Gebiet  $S = [0, 2\pi]^2$  lauten für die Geschwindigkeiten und den Druck

$$\begin{aligned} u_x^{\text{ref}}(x, y, t) &= +u_0 \sin(x - u_h t) \cos(y) \exp(-2\nu t) \\ u_y^{\text{ref}}(x, y, t) &= -u_0 \cos(x - u_h t) \sin(y) \exp(-2\nu t) \\ P^{\text{ref}}(x, y, t) &= \frac{1}{4} (\cos(2(x - u_h t)) + \cos(2y)) \exp(-4\nu t), \end{aligned}$$



**Abbildung 5.1:** Fehler des bewegten zweidimensionalen Taylor-Green-Wirbels in Bezug auf die analytische Lösung. Links: Ohne horizontale Bewegung. Rechts: Mit horizontaler Bewegung mit  $Ma = 0.05$ . Ähnlich in [220].

wobei  $u_0 = 0.01$  ein Maß für die Rotationsgeschwindigkeit der Wirbel ist und  $u_h$  die Horizontalgeschwindigkeit der Wirbel bezeichnet. Es werden zwei Fälle der Horizontalgeschwindigkeit betrachtet:  $u_h = 0$  sowie  $u_h = 0.05$ , wobei die Gittergeschwindigkeit auf  $c_s = 1$  festgelegt wird. Als Geschwindigkeitssätze kamen die Geschwindigkeitssätze D2Q9 mit  $\mathfrak{N} = 5$  und D2Q25 mit  $\mathfrak{N} = 9$  zum Einsatz. Die Ordnung der finiten Elemente war durchweg  $p = 4$ , die Simulationsendzeit  $t_{\text{end}} = 0.1$  und die Reynoldszahl  $Re = u_0 l / \nu = 10$ . In Abb. 5.1 sind die Ergebnisse dargestellt. Im unbewegten Fall a) ist erkennbar, dass der räumliche Fehler bei kleinen Auflösungen zunächst mit dritter bis vierter Ordnung abnimmt, bei feineren Auflösungen dagegen, wie im vorherigen Testfall der Dichteschwankung, mit zweiter Ordnung. Es ist außerdem zu beobachten, dass der Interpolationsfehler bei D2Q25 zu einem größeren Gesamtfehler als bei D2Q9 führt, was auf die größere Anzahl  $Q$  zu lösender Advektionsgleichungen zurückzuführen ist. Betrachtet man jedoch den bewegten Fall b), ergibt sich dagegen ein anderes Bild. Wie in Abschnitt 2.5 dargelegt, gibt es bei unzureichenden Quadraturgraden  $\mathfrak{N} < 6$  einen machzahlabhängigen Fehler im Spannungstensor. Dieser manifestiert sich in einem deutlich erhöhten Fehler für D2Q9, während D2Q25 – trotz der Bewegung der Wirbel – nahezu die gleichen Fehler über alle Auflösungen hinweg erzielt wie im unbewegten Fall. Zur Auslotung der maximal erreichbaren Machzahlen mit der kompressiblen SLLBM mit D2Q25, wurden bei festgelegter Auflösung von  $N_{Res} = 128^2$  verschiedene horizontale Machzahlen simuliert und die Fehler verglichen. Wie in Abb. 5.2 zu sehen, ist der Fehler zunächst maßgeblich von der gewählten Zeitschrittweite abhängig, allerdings zeigt sich in Bezug auf diese ein lokales Minimum bei  $\delta_t = 0.0004$ . Dies ist, wie in Abschnitt 3.3.5 beschrieben, eine Eigenart der Semi-Lagrangeschen Verfahren. Außerdem zeigt sich, dass die maximale Machzahl von der Zeitschrittweite abhängt, allerdings sind Machzahlen um  $Ma \approx 2.0$  mit der hier verwendeten Konfiguration prinzipiell möglich.



**Abbildung 5.2:** Fehler des bewegten zweidimensionalen Taylor-Green-Wirbels bei  $N_{Res} = 128^2$  in Bezug auf die analytische Lösung mit verschiedenen horizontalen Machzahlen. Aus [220].

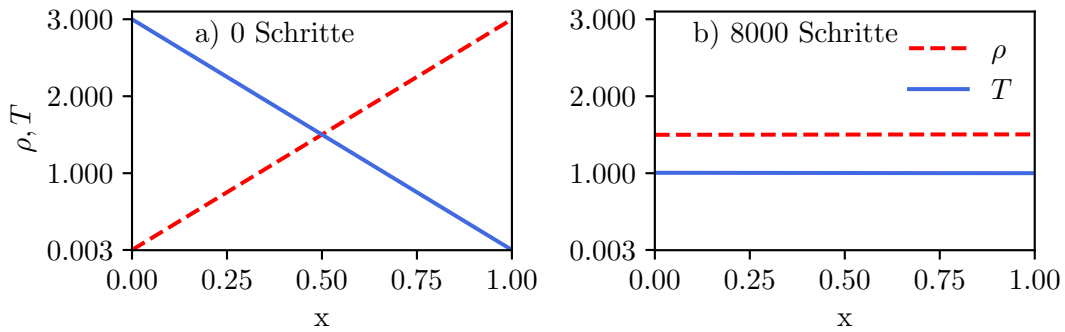
### 5.1.3 Test des Temperaturbereichs

Die SLLBM nutzt die polynomielle Entwicklung des Gleichgewichts, bei der die Gewichte der Quadratur temperaturunabhängig sind, was den Ansatz bspw. von den temperaturabhängigen Gewichten im Modell von Frapolli et al. unterscheidet [66]. Dadurch ergibt sich ein großer Temperaturbereich der Methode, der sich mithilfe eines einfach Advektions-Diffusionstests zeigen lässt. Die Anfangsbedingungen in der eindimensionalen Simulationsdomäne sind

$$\begin{aligned}\rho(x, t = 0) &= 3.000 - 2.997x, \\ T(x, t = 0) &= 0.003 + 2.997x.\end{aligned}\tag{5.5}$$

Das Temperatur- und Dichteverhältnis aus Maximal- und Minimalwerten beträgt somit jeweils 1:1000. Die Auflösung war  $N_{\Xi} = 50$ , die Ordnung der finite Elemente  $p = 4$ , die Viskosität wurde auf  $\mu = 0.001$  gesetzt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.3 dargestellt. Nach dem Simulationsstart finden eine Reihe von Ausgleichseffekten statt bis sich nach einer hinreichend großen Anzahl an Simulationsschritten (hier: 8000), unter Berücksichtigung von Massen- und Energieerhaltung, der Endzustand einpendelt. Dieser lässt sich ebenso errechnen

$$\begin{aligned}\rho(x, t \rightarrow \infty) &= \int_0^1 \rho(x, 0) dx = 1.5015, \\ \rho(x, t \rightarrow \infty)T(x, t \rightarrow \infty) &= \int_0^1 \rho(x, 0)T(x, 0) dx = 1.506, \\ T(x, t \rightarrow \infty) &= \frac{\rho(x, t \rightarrow \infty)T(x, t \rightarrow \infty)}{\rho(x, t \rightarrow \infty)} = 1.002.\end{aligned}\tag{5.6}$$



**Abbildung 5.3:** Einfacher Advektions-Diffusionstest, um zu zeigen, dass die vorgeschlagene Methode große Temperaturunterschiede erfassen kann.

Dieser Endzustand stellte sich auch in der Simulation mit der SLLBM ein, was demonstriert, dass prinzipiell große Temperaturverhältnisse simuliert werden können.

## 5.2 Eindimensionales Riemann-Problem und Stoßrohr

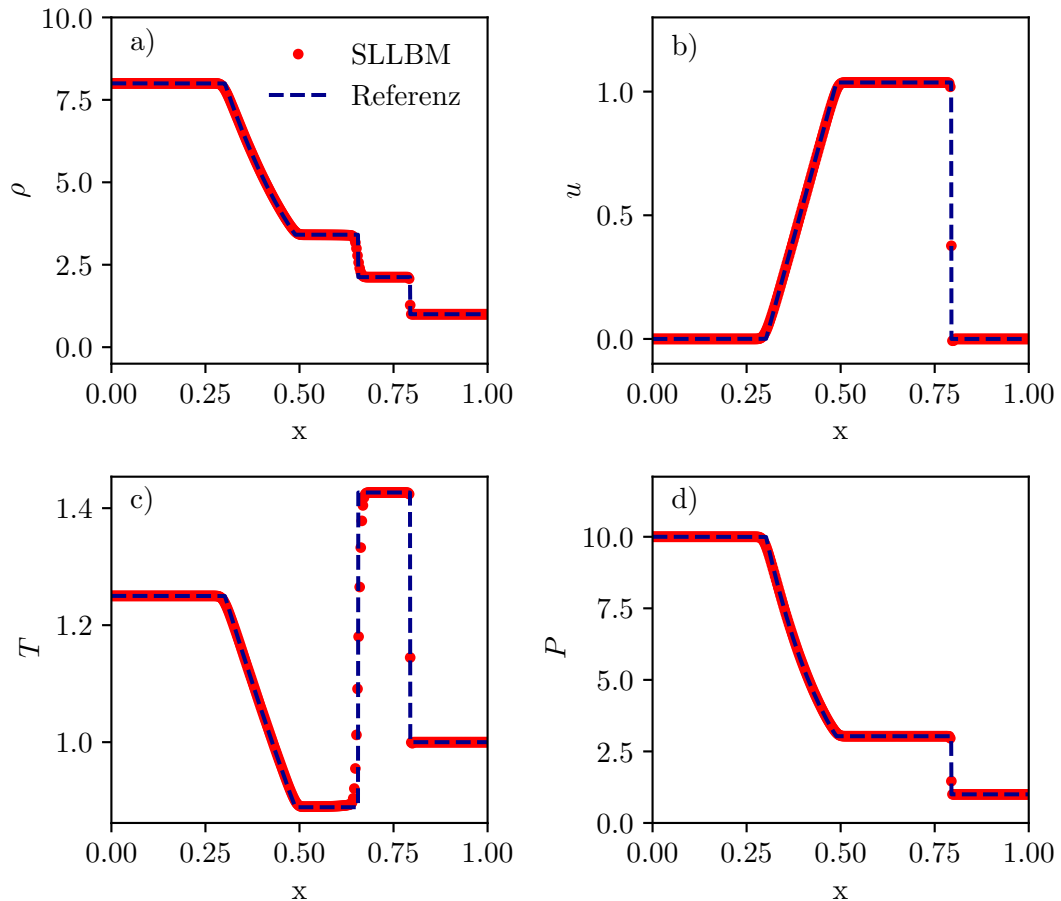
Nach erfolgter Validierung wurde die neu entwickelte SLLBM für kompressible Strömungen an einem Stoßrohr nach Sod [191] getestet, um zu prüfen, wie die Methode mit Unstetigkeiten der makroskopischen Größen umgehen kann. Dieser Testfall teilt eine eindimensionale Simulationsdomäne der Größe  $x \in [0, 1]$ , wie in Tabelle 5.2 dargestellt, initial in zwei Hälften bezüglich Dichte und Temperatur auf. Die Initialbedingungen sind in Tabelle 5.2 aufgeführt. Das Dichteverhältnis des Testfalls beträgt 8:1 und das Druckverhältnis 10:1.

Der Testfall zeichnet sich dadurch aus, dass sich im zeitlichen Verlauf zwei unterschiedliche Diskontinuitäten ausbilden. Einerseits breitet sich von der Mitte her in Richtung niedrigeren Druckes eine Stoßwelle aus, mit dort abfallendem Druck, Geschwindigkeit und Dichte. Andererseits zeigt sich eine Kontaktdiskontinuität, über die der Druck konstant bleibt, während die Temperatur ansteigt und die Dichte abfällt. Zuletzt gibt es noch eine Expansionswelle, die sich im Bereich des verdünnenden Gases entgegen der Stoßrichtung ausbreitet bei der die Größen sich kontinuierlich über die Länge der Expansionswelle ändern. Die makroskopischen Größen sind über die ideale Gasgleichung  $P = \rho RT$  gekoppelt, während sich die makroskopischen Größen beiderseits der Stöße über die Rankine-Hugoniot-Beziehungen berechnen lassen.

Die Simulationsdomäne wurde mit  $N_{\Xi} = 200$  Zellen und der Ordnung der Ansatzfunktionen  $p = 4$  diskretisiert. Die Zeitschrittweite betrug  $\delta_t = 0.0002$ , sodass der Zeitpunkt  $t_{\text{Ende}} = 0.15$  nach 735 Zeitschritten erreicht wurde. Der Isentropenexponent

**Tabelle 5.2:** Anfangsbedingungen des Stoßrohrs nach Sod [191].

$\rho = 8, u = 0, T = 1.25$	$\rho = 1, u = 0, T = 1$
-----------------------------	--------------------------



**Abbildung 5.4:** Dichte a), Geschwindigkeit b), Temperatur c) und Druck d) der Stoßrohr-Simulation mit der kompressiblen SLLBM. Die Auflösung betrug  $N_P = 800$  bei Ordnung der Finiten Elemente  $p = 4$ , d.h. die Anzahl der Zellen betrug  $N_{\Xi} = 200$ .

wurde auf  $\gamma = 1.4$  eingestellt, die Prandtlzahl auf  $Pr = 1.0$ . Als Geschwindigkeitssatz kam D2Q25 mit dem Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$  zum Einsatz.

Wie in Abb. 5.4 zu erkennen, ist die SLLBM grundsätzlich in der Lage, die Stöße zu erfassen, ohne dass sich nennenswerte Oszillationen in die stetigen Bereiche der Lösung übertragen. Während die Stoßwelle sehr scharf aufgelöst wird, ist die Steigung der Kontaktdiskontinuität geringfügig flacher.

In einem weiterführenden Schritt dient der Testfall dazu, auch den Stabilitätsbereich



des Verfahrens weiter zu untersuchen und mit einer On-Lattice-Konfiguration zu vergleichen. Dazu wurde der SLLBM-Strömungsschritt durch den üblichen Strömungsschritt der Standard-LBM in Kombination mit einem D2V37-Geschwindigkeitssatz (s. Abschnitt 4.2.3 ersetzt, während die restliche Konfiguration identisch war. Die Zeitschrittweite des On-Lattice-Lösers ist aufgrund der Kopplung von räumlicher und zeitlicher Diskretisierung nicht einstellbar und somit von der räumlichen Auflösung abhängig. Für den On-Lattice-Löser sind die Ergebnisse in der oberen Hälfte von Abb. 5.5 dargestellt. Als stabil wird eine Simulation angesehen, wenn die makroskopischen Größen im Laufe der Simulation begrenzt bleiben, als instabil, wenn die Lösung divergiert. Mit der Viskosität  $\nu_{\text{phys}}$  ist hierbei die Viskosität bezogen auf die Domäne  $x \in [0, 1]$  gemeint. Abb. 5.5 zeigt, dass insbesondere kleine Viskositäten mit dem D2V37-On-Lattice-Löser nicht stabil gerechnet werden können, oder nur, wenn die Auflösung außerordentlich hoch gewählt wird. Wie in Abb. 5.5 dargestellt, ergibt sich für den SLLBM-Löser ein anderes Bild, denn die einstellbare Zeitschrittweite kann dem Problem so angepasst werden, dass die Simulationen stabilisiert werden können. Die variable Zeitschrittweite ist somit eine Schlüsselfähigkeit der SLLBM gegenüber On-Lattice-Methoden.

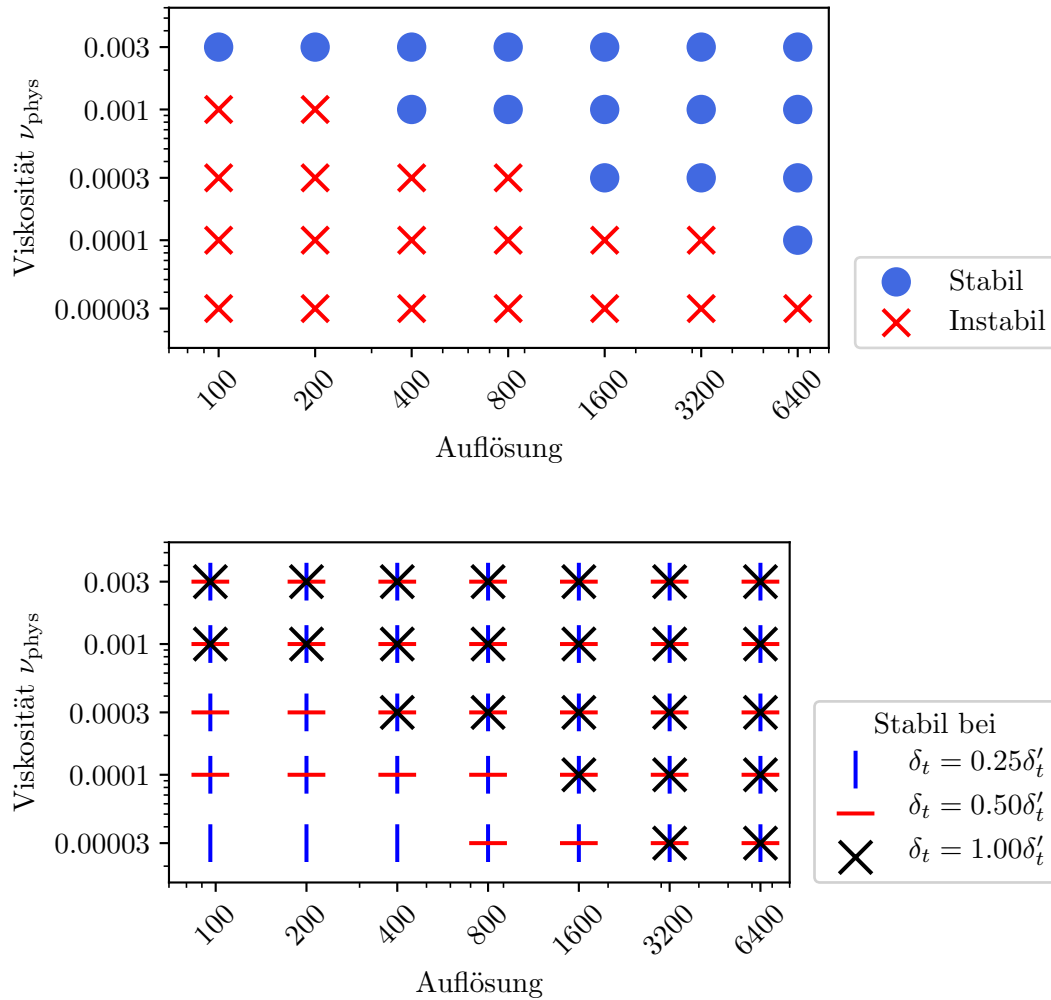
## 5.3 Simulationen zweidimensionaler kompressibler Probleme

### 5.3.1 Zweidimensionales Riemann-Problem

Die eindimensionalen Stoßrohr- bzw. Riemann-Testfälle lassen sich auf ähnliche Art und Weise auf zwei Dimensionen erweitern, wie z.B. in den Arbeiten von Lax [131] oder Kurganov und Tadmor [124] erörtert. Die Anfangsbedingungen für Dichte  $\rho$ , Geschwindigkeiten  $u_\alpha$  und Druck  $P$  eines ausgewählten Testfalls sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst.

Das Simulationsgebiet wurde in  $N_\Xi = 128 \times 128$  Zellen mit einer Ordnung der finiten Elemente von  $p = 4$  diskretisiert, was zu  $N = 512 \times 512$  Gitterpunkten führt [220]. Die Zeitschrittweite der SLLBM mit D2Q25 betrug zunächst  $\delta_t = 1.2 \cdot 10^{-4}$  und die dynamische Viskosität  $\mu = 1.7 \cdot 10^{-4}$ . Der Isentropenexponent wurde auf  $\gamma = 1.4$  gesetzt. An den Rändern der Simulationsdomäne sollen verschwindende Gradienten der Verteilungsfunktionen  $\partial f = 0$  gelten, was durch eine Vergrößerung der Simulationsdomäne über den Interessenbereich hinaus erreicht wurde. Auf diese Art und Weise wurde sichergestellt, dass die Lösung nicht durch die Randbedingungen gestört wird [220].

Zusätzlich zu den Ergebnissen mit der SLLBM in [220] wurde die Simulation mit einem Finite-Volumen-Verfahren vierter Ordnung (FV4, [145]) mit Runge-Kutta-Zeitintegration vierter Ordnung zur Lösung der kompressiblen Euler-Gleichungen wiederholt. Dazu kam der Python-Code *Pyro* zum Einsatz [89], der an den Stößen

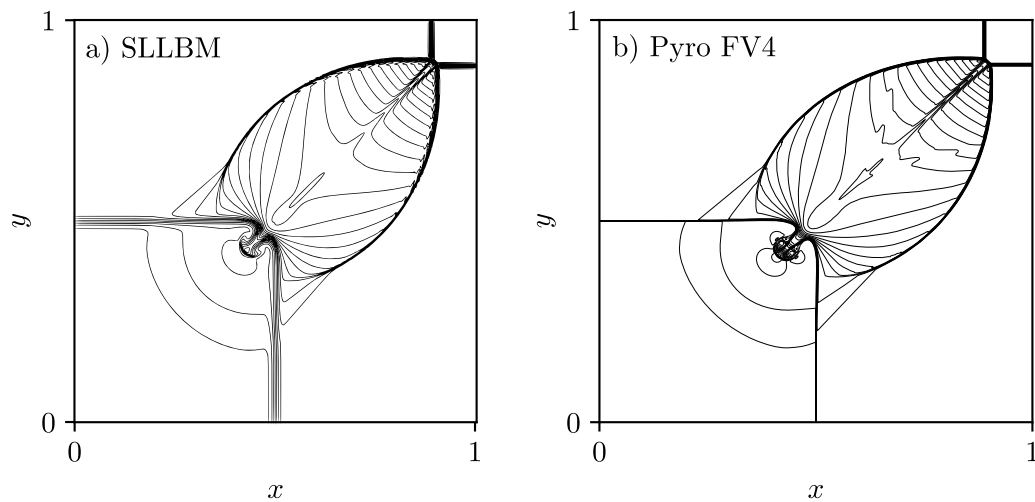


**Abbildung 5.5:** Karte stabiler Simulationen des Stoßrohrs mit der On-Lattice-Boltzmann-Methode (oben) und mit der SLLBM (unten), bezogen auf die Viskosität  $\nu_{\text{phys}}$  und die räumliche Auflösung. Als stabil wird eine Simulation angesehen, wenn die makroskopischen Größen im Laufe der Simulation nicht divergieren. Die Referenzzeitschrittweite  $\delta'_t$  entspricht der Zeitschrittweite der jeweiligen On-Lattice-Boltzmann-Simulation. Aus [220].

einen Limiter vierter Ordnung in Verbindung mit künstlicher Viskosität einsetzt. Die Zeitschrittweite war  $\delta_t = 3.3 \cdot 10^{-4}$ . Der Vergleich von SLLBM und FV4 anhand 45 gleichverteilter Isokonturen ist in Abb. 5.6 aufgeführt. Qualitativ zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen beiden Methoden, wobei die ruhenden Stöße entlang  $x = 0.5$  bzw.  $y = 0.5$  im Falle der SLLBM eine deutliche Verbreiterung zeigen, was auch dazu führt, dass die kleine Tasche im dritten Quadranten weniger detailliert zu erkennen ist.

**Tabelle 5.3:** Anfangsbedingungen des 2D-Riemann-Problems [131]. Tabelle aus [220] übernommen.

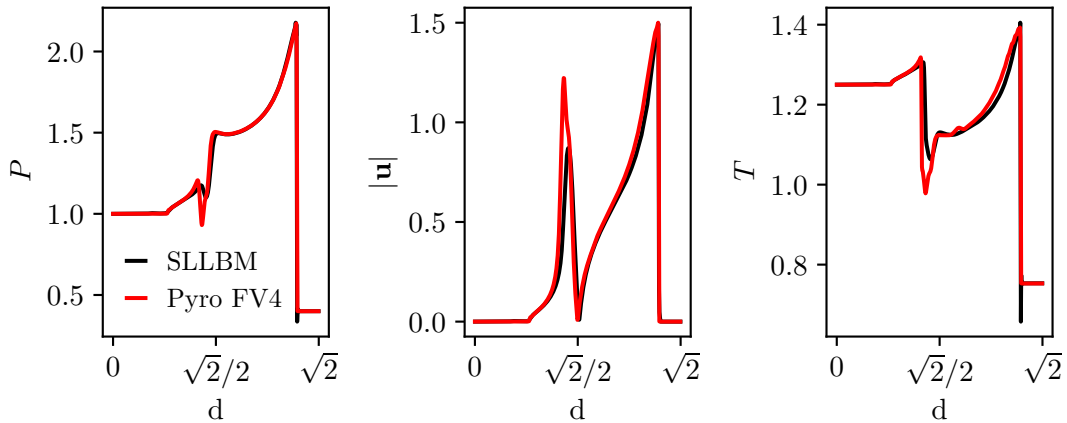
$\rho = 1$	$\rho = 0.5313$
$u_x = 0.7276$	$u_x = 0$
$u_y = 0$	$u_y = 0$
$P = 1$	$P = 0.4$
$\rho = 0.8$	$\rho = 1$
$u_x = 0$	$u_x = 0$
$u_y = 0$	$u_y = 0.7276$
$P = 1$	$P = 1$



**Abbildung 5.6:** Darstellung von 45 Dichte-Isokonturen des Riemann-Problems mit  $N = 512 \times 512$  im Intervall  $\rho \in [0.412, 1.753]$ . In a) ist die SLLBM mit Ordnung der finiten Elemente  $p = 4$  gezeigt, b) ist mit dem Code *Pyro* [89] ermittelt, der einen Euler-Finite-Volumen-Löser vierter Ordnung (FV4) mit einem Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung verwendet.

Zur Quantifizierung der Ergebnisse sind die makroskopischen Größen entlang der Diagonalen  $x = y$  in Abb. 5.7 dargestellt. Während die sich in positive x- und y-Richtung ausbreitende, starke Stoßfront der SLLBM exzellent mit der FV4-Stoßfront übereinstimmt, so weichen die Werte nahe des in negative x- und y-Richtung verlaufenden kleinen Säckchens leicht ab. Insgesamt ist dies ein Effekt der nicht vernachlässigbaren, vorgegebenen Viskosität.

Anhand des Testfalls kann auch demonstriert werden, wie sich steigende Zeitschrittweiten bei gleicher sonstiger Konfiguration auf die Lösung auswirken. Dazu sind die



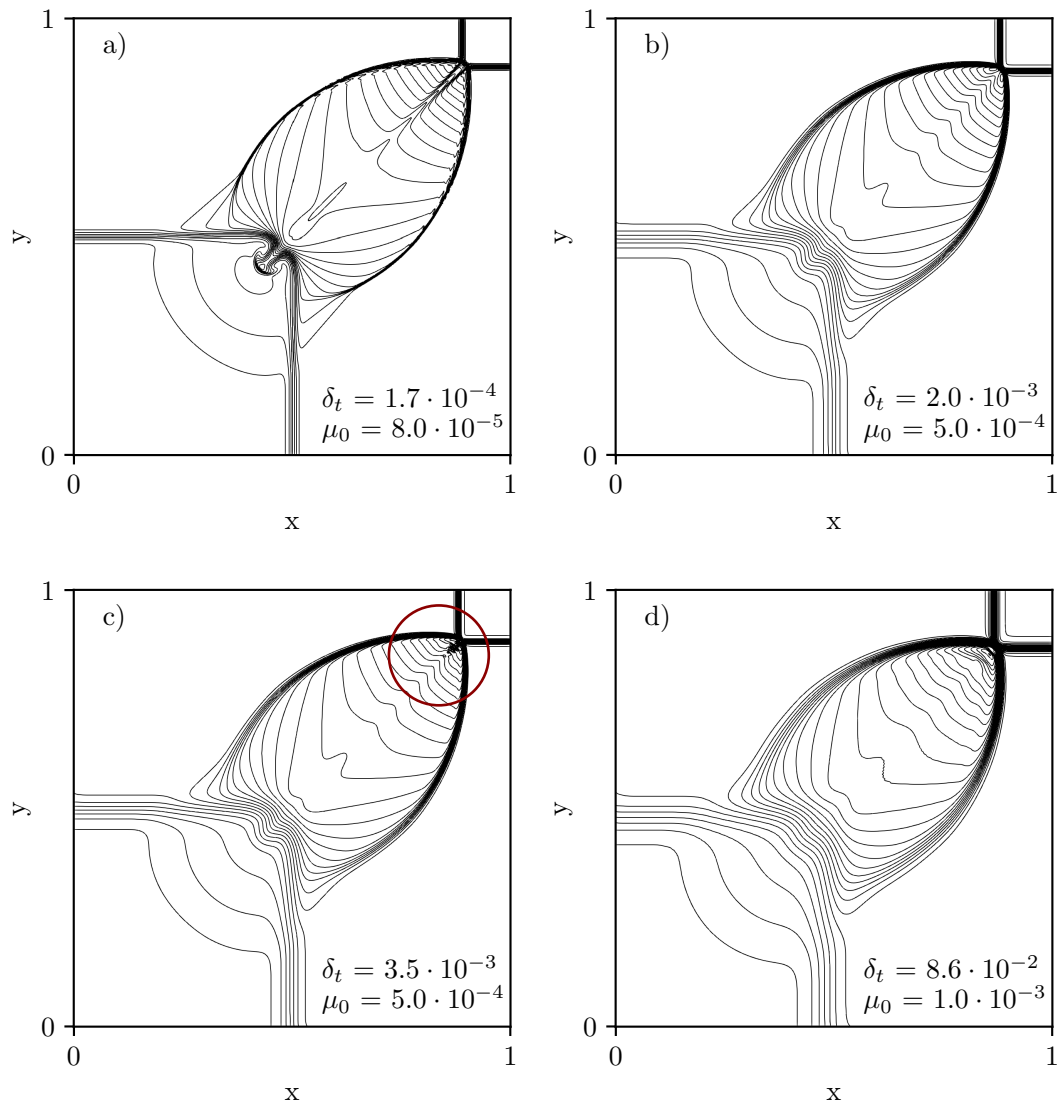
**Abbildung 5.7:** Druck, Betrag der Geschwindigkeit und Temperatur der SLLBM für das in Abb. 5.6 dargestellte Riemann-Problem entlang der Diagonalen  $d$  mit  $x = y$  für die Löser SLLBM und Pyro FV4 [89].

Dichtekonturen für verschiedene Kombinationen aus Zeitschrittweite und Viskosität in Abb. 5.8 abgebildet. Zusammengefasst lässt sich erkennen, dass die Zeitschrittweite trotz der recht hohen räumlichen Auflösung vergrößert werden kann. Dies erfordert allerdings, dass die Viskosität ebenso ansteigt. Außerdem ist zu erwähnen, dass die CFL-Bedingung von FV4 bewirkt, dass die Zeitschrittweiten so klein gewählt werden mussten, dass ausschließlich Simulation 5.8a) mit FV4 stabil simuliert werden konnte (siehe Abb. 5.6).

### 5.3.2 Stoß-Wirbel-Interaktion

Die zweidimensionale Stoß-Wirbel-Interaktion wurde ursprünglich von Inoue und Hattori ausführlich untersucht [103]. Dabei wurden die Gradienten der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in der Originalarbeit mit einem kompakten Finite-Differenzen-Schema sechster Ordnung nach Lele [133] diskretisiert und zur Zeitintegration kam ein Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung zum Einsatz. Insbesondere zur Validierung von Lattice-Boltzmann-Verfahren für kompressible Strömungen wurde dieser Testfall in den letzten Jahren häufig genutzt [67, 94, 175].

Bei diesem Testfall wird ein Wirbel im Laufe der Simulation durch einen Verdichtungsstoß bewegt, woraufhin der Wirbel mit dem Stoß in Wechselwirkung tritt. Dadurch emittiert der Wirbel akustische Wellen, die sich mit Schallgeschwindigkeit vom Wirbel entfernen. Außerdem zieht der Wirbel nach der Durchquerung des Stoßes eine Diskontinuität hinter sich her. Die Herausforderung für den Löser besteht nun darin, die filigranen akustischen Dichteschwankungen trotz der Diskontinuitäten in den makroskopischen Größen zu erfassen.



**Abbildung 5.8:** Vergleich der SLLBM-Dichte-Isokonturen für das zweidimensionale Riemannproblem für verschiedene Zeitschrittweiten und Viskositäten. Im roten Kreis sind erste Instabilitäten erkennbar, falls die Zeitschrittweite für eine gegebene Viskosität zu groß gewählt wird. Nur Simulation a) konnte aufgrund der CFL-Bedingung mit dem Vergleichslöser FV4 stabil simuliert werden (siehe Abb. 5.6.)

Die Advektionsgeschwindigkeit des Wirbels beträgt (von rechts nach links)  $Ma = -1.2$ . Durch die Rankine-Hugoniot-Stoßbeziehungen ergibt sich eine Machzahl von  $Ma = -0.842$  hinter dem Stoß [220]. Die Geschwindigkeit des Wirbels in Abhängigkeit des Radius  $r$  beträgt

$$u_\theta(r) = \sqrt{\gamma T} Ma_v r \exp((1 - r^2)/2), \quad (5.7)$$

wobei  $Ma_v$  eine Größe für die Rotationsgeschwindigkeit des Wirbels ist. Druck und Dichte werden durch

$$P(r) = \frac{1}{\gamma} \left( 1 - \frac{\gamma - 1}{2} Ma_v \exp(1 - r^2) \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (5.8)$$

sowie

$$\rho(r) = \left( 1 - \frac{\gamma - 1}{2} Ma_v \exp(1 - r^2) \right)^{1/(\gamma-1)} \quad (5.9)$$

bestimmt.

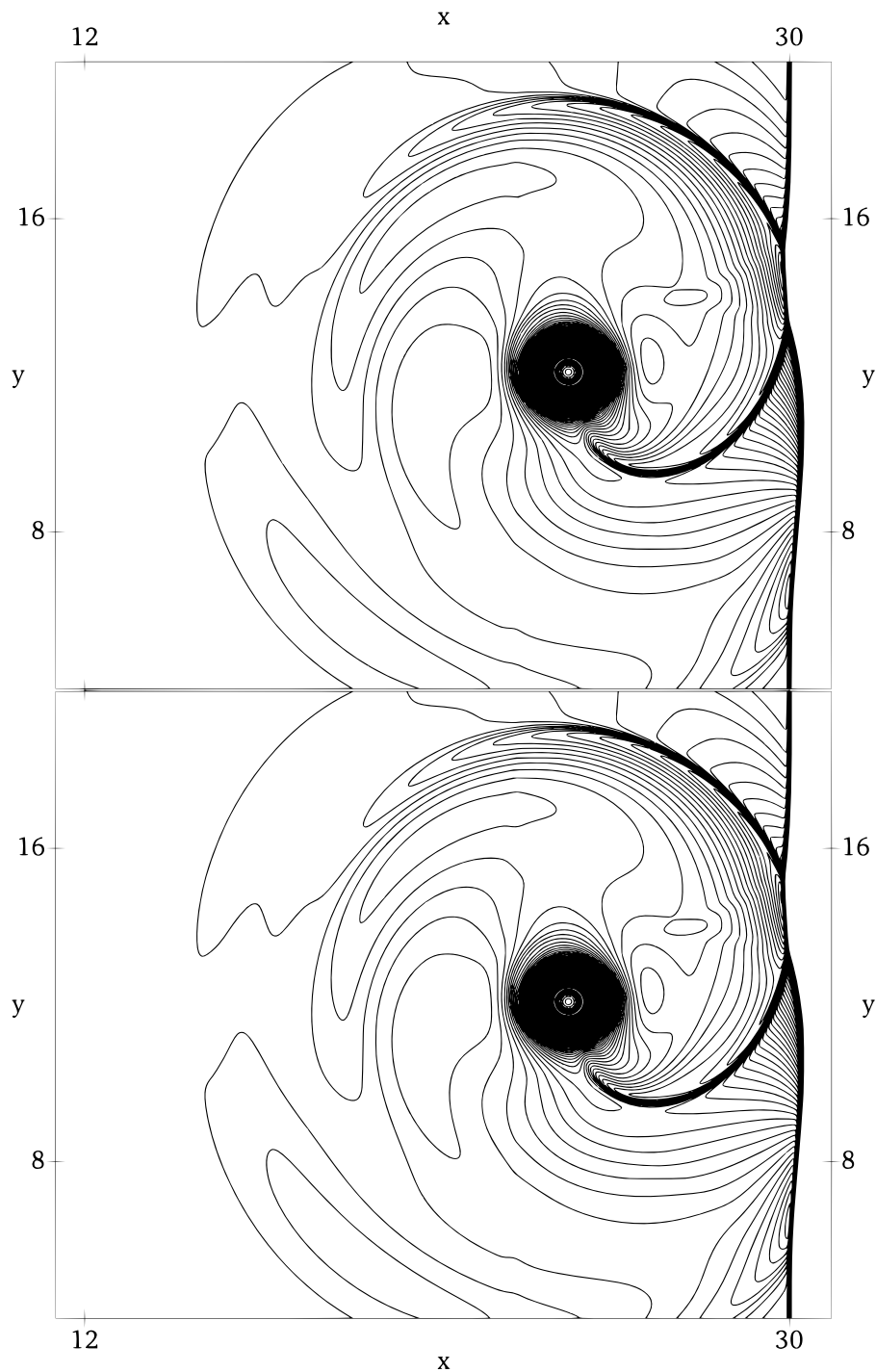
Das Gebiet der Simulation betrug  $60 \times 24$ , welches mit  $N_\Xi = 256 \times 256$  Zellen unter Verwendung der polynomiellen Ordnung  $p = 4$  diskretisiert wurde. Da der die Auflösung des Stoßes von entscheidender Bedeutung für die Genauigkeit der Simulation ist, wurde das Gitter mithilfe der folgenden Transformationsfunktion gestaucht [220]

$$x_{\text{trans}} = \frac{30}{\pi} \left( \Lambda \sin\left(\frac{\pi}{30}(x)\right) + \frac{\pi}{30}x \right). \quad (5.10)$$

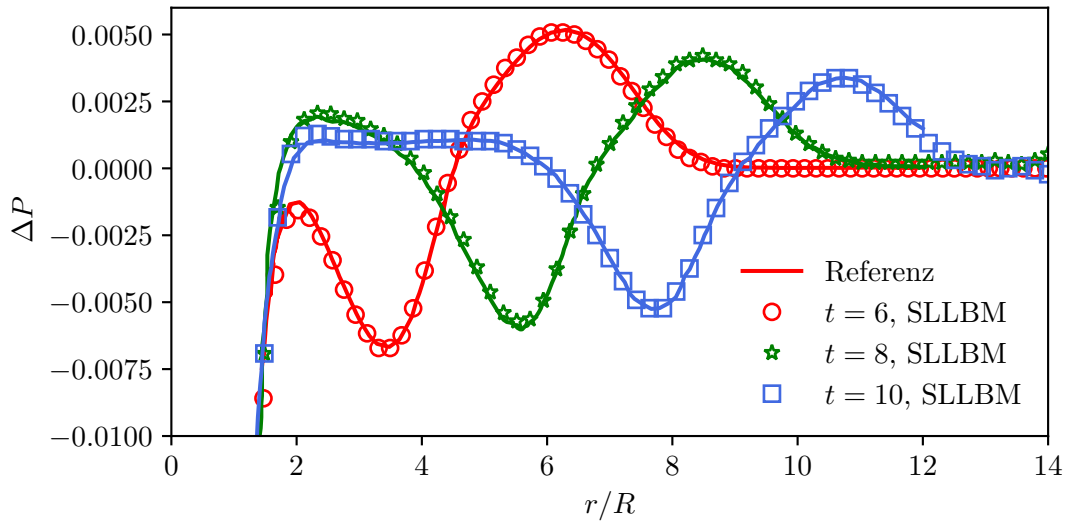
Der Stauchungsfaktor  $\Lambda$  wurde mit  $\Lambda = 0.95$  festgelegt. Die Position des Stoßes war  $x_{\text{Stoß}} = 30$ , während die Mitte des Wirbels bei  $x_{\text{Wirbel}} = 32$  initialisiert wurde.

Anhand dieses Anwendungsfalls konnte gezeigt werden, dass sich die Ergebnisse mit den Geschwindigkeitssätzen D2Q19 und D2Q25 praktisch nicht unterscheiden. Die obere Hälfte von Abb. 5.9 zeigt die Dichtekonturen zum Zeitpunkt  $t = 8$  mit dem D2Q19-, die untere Hälfte mit dem D2Q25-Geschwindigkeitssatz. Trotz der grundlegend unterschiedlichen Geschwindigkeitssätze sind keine Unterschiede erkennbar und auch zu der Referenz von Inoue und Hattori ergab sich visuell eine sehr gute Übereinstimmung [103].

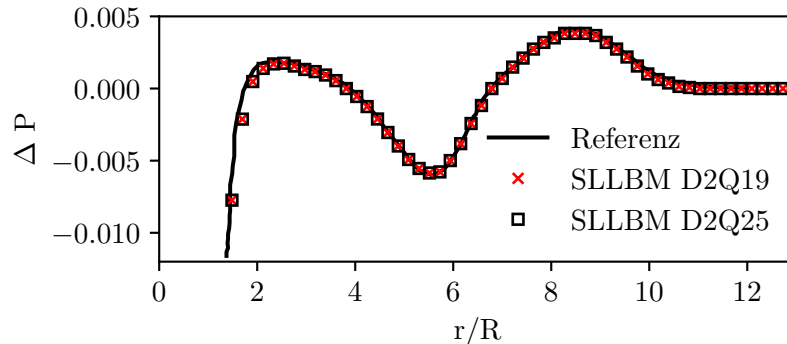
Zur Quantifizierung der Simulationen wurden diese bei einer leicht veränderten Konfiguration mit  $Ma_v = 0.25$  und  $Re = 800$  wiederholt und mit den DNS-Daten zum normalisierten Druck  $\Delta P = (P - P_B)/P_B$  verglichen, wobei  $P_B$  den anfänglichen Druck in Region B bezeichnet. Der Druck  $P$  wird dabei zu den Zeitpunkten  $t = 6$ ,  $t = 8$  sowie  $t = 10$  von der Wirbelmitte ausgehend entlang einer zur X-Achse um  $135^\circ$  Grad geneigten Halbstrecke gemessen. Abb. 5.10 zeigt die gute Übereinstimmung der SLLBM-Ergebnisse mit der Referenz von Inoue und Hattori.



**Abbildung 5.9:** Dichte-Isokonturen der Stoß-Wirbel-Interaktion bei Verwendung der Wirbelmachzahl  $Ma_v = 0.5$  und der Reynoldszahl  $Re = 400$  mit den Geschwindigkeitssätzen D2Q19 (oben) und D2Q25 (unten). Insgesamt sind 119 Isokonturen im Bereich  $\rho \in [0.92, 1.55]$  dargestellt. Visuell ist zwischen beiden Simulationen kein Unterschied zu erkennen. Quelle: [218].



**Abbildung 5.10:** Vergleich des normierten Drucks  $\Delta P$  mit der SLLBM mit D2Q25 im Vergleich zur Referenz von Inoue und Hattori zu den Zeitpunkten  $t = 6$ ,  $t = 8$  und  $t = 10$ . Quelle: [220].

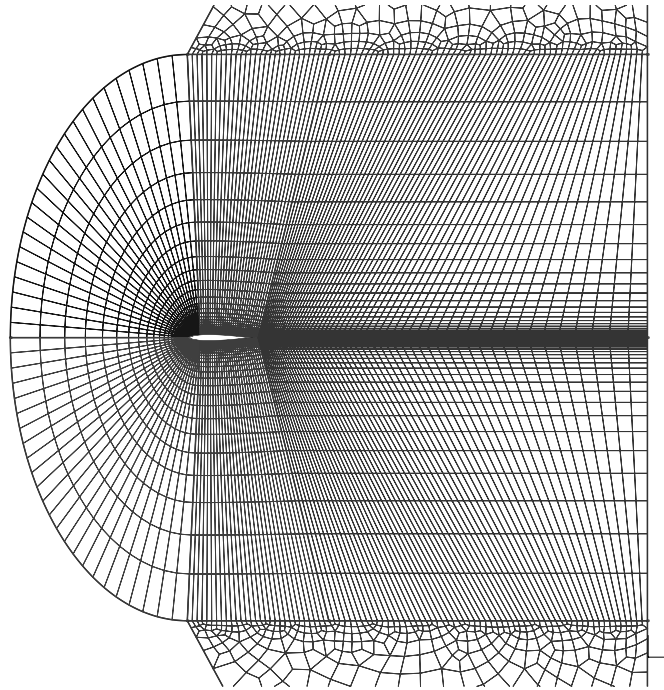


**Abbildung 5.11:** Vergleich des normierten Drucks für die Geschwindigkeitssätze D2Q19 und D2Q25. Quelle: [218].

### 5.3.3 Viskose, supersonische 2D-Umströmung eines NACA-0012-Tragflächenprofils

Zur Durchführung einer kompressiblen SLLBM-Simulation mit Festkörper-Randbedingungen wurde ein NACA-0012-Tragflächenprofil mit Machzahl  $Ma = 1.5$  ausgewählt. Der Anstellwinkel (engl. *angle of attack*) betrug  $AoA = 0^\circ$  und die Reynoldszahl wurde mit  $Re = 10000$  in Bezug auf die Länge  $C$  der Tragflächensehne festgelegt, womit die Konfiguration mit den Arbeiten von Hafez und Wahba [86], Latt et al. [130], sowie Frapolli et al. [65] vergleichbar ist. Die folgenden Ergebnisse sind





**Abbildung 5.12:** Prinzipielle Struktur des numerischen Netzes für die viskose, supersonische 2D-Umströmung des NACA-0012-Tragflächenprofils. Für die eigentliche Simulation wurde das Netz weiter verfeinert.

bisher unveröffentlicht.

Das Gebiet wurde mit einem strukturierten, jedoch körperangepassten Gitter gerechnet, wie es schematisch in Abb. 5.12 zu sehen ist. Erzeugt wurde das Netz mit dem Softwarepaket *Gmsh* [75], welches eine gute Kompatibilität mit dem Finite-Elemente-Paket *Deal.II* aufweist, auf dem der SLLBM-Löser basiert. Das gezeigte Gitter wurde für die Simulation noch einige Male verfeinert, sodass insgesamt 1.86 Millionen Gitterpunkte im Gebiet verteilt wurden, wobei der Grad der Ansatzfunktionen  $p = 4$  betrug. Die Zeitschrittweite betrug  $\delta_t = 0.00015$  und die Simulation lief insgesamt 200000 Zeitschritte bis  $t = 30$ . Als Einlass wurden Gleichgewichtsrandbedingungen verwendet, für den Auslass kamen die Auslassrandbedingungen aus Abschnitt 3.4.3 zum Einsatz. An den parallel zur Tragflächensehne verlaufenden Domänengrenzen wurde jeweils eine Pufferzone bzw. *Sponge Zone* mit zunehmend grobmaschigeren, unstrukturierten Zellen eingerichtet, um alle Stöße so aus dem Simulationsgebiet zu führen, dass keine störenden Stoßreflektionen auftreten konnten, wie sie z.B. in [130] zu sehen sind. Der Geschwindigkeitsraum wurde mit dem D2Q19-Geschwindigkeitssatz mit  $\mathfrak{N} = 9$  diskretisiert. Zu Beginn der Simulation wurde das Strömungsgebiet mit einer geringfügigen Störung im Geschwindigkeitsfeld überlagert, um eine Wirbelstraße im Nachlauf anzuregen.

Abb. 5.13 zeigt den Temperaturverlauf der konvergierten Strömung und die bis zu ca.

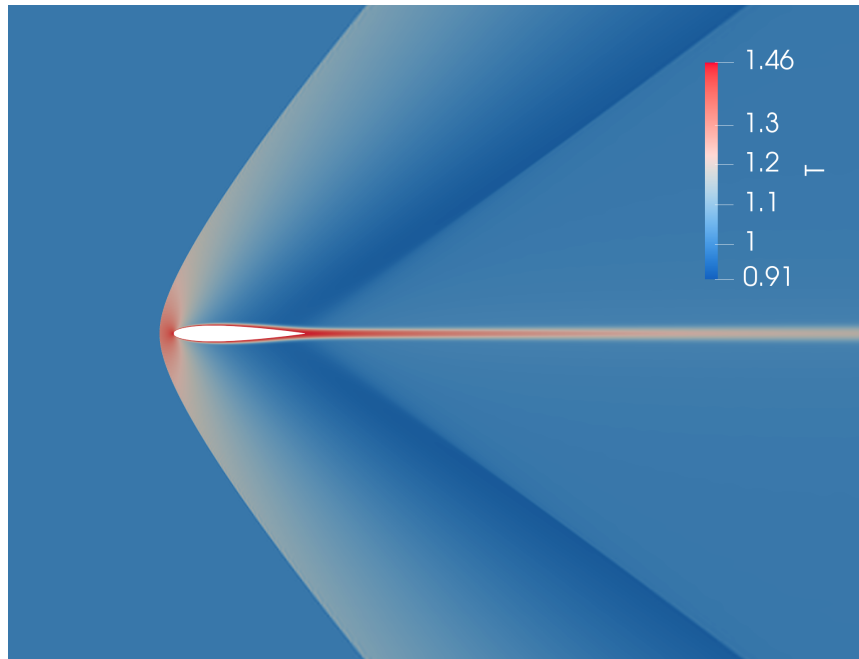
46-prozentige Aufheizung des Fluids um die Tragfläche herum. Klar zu erkennen sind zudem der gebogene Stoß vor dem Tragflächenprofil, der bei runden Konturen nicht am Körper anliegt, sondern vom Körper räumlich abgesetzt ist. Folglich existiert unmittelbar an der Profilverderrkante ein Staupunkt. Ausgehend von der Hinterkante bildet sich ein weiterer Stoß mit spitzerem Winkel in Bezug auf die Anströmrichtung aus. Insgesamt ist die visuelle Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Latt et al. [130], Hafez und Wahba [86] sowie Frapolli et al. [65] sehr gut. Eine Ausnahme hierzu sind allerdings die Beobachtungen des Nachlaufs der Strömung: Während Frapolli et al. und Latt et al. eine stabile Wirbelstraße beobachten, ist diese hier im auskonvergierten Fall nicht sichtbar. Dies deckt sich mit den Beobachtungen von Hafez und Wahba [86]. In der Einschwingphase dagegen ist die Wirbelstraße zu beobachten, was in der linken Hälfte von Abb. 5.14 zum Zeitpunkt  $t = 6.5$  dargestellt ist, allerdings stabilisiert sich der Nachlauf nach einiger Zeit. Um die Ursache dieser Abweichung zu ergründen, wurden weitere Konfigurationen mit Anstellwinkeln  $\text{AoA} \in \{1^\circ, 2^\circ, 3^\circ, 4^\circ\}$  sowie  $\text{Re} = 20000$  gerechnet, allerdings bildete sich eine stabile Wirbelstraße ohne weitere Störungen trotz der Inklination oder der erhöhten Reynoldszahl nicht aus. Gleiches gilt bei einer Erhöhung der Ordnung der Ansatzfunktionen auf  $p = 6$  und die Verwendung des D2Q25-Geschwindigkeitssatzes. Einzig, wenn Störungen im Simulationsgebiet vorlagen, wie z.B. bei einem unzureichend aufgelösten Stoß oder bei schlechter Vernetzung, konnte die Wirbelstraße wieder beobachtet werden.

Eine mögliche weitere Erklärung für die Abweichung zu den Arbeiten von Frapolli et al. sowie Latt et al. ist das körperangepasste Gitter der SLLBM-Simulationen, womit insbesondere die filigrane Hinterkante des Tragflächenprofils exzellent aufgelöst werden kann, wohingegen die genannten Autoren mit einem kartesischen, gestuften Gitter rechneten. Dies könnte zu Störungen im Nachlauf führen, die dann die Anregung der Wirbelstraße verursachen. Dieser Erklärungsversuch wird von einer Abbildung in der Arbeit von Saadat et al. mit SLLBM-Simulationen mit körperangepassten, unstrukturierten Gittern unterstützt [176]. Eine der Abbildungen dieser Arbeit zeigt lediglich die Initialphase der Simulation mit Wirbelstraße, während die auskonvergierte Lösung nicht gezeigt wird. Es ist daher zu vermuten, dass in der Folge auch dort eine Stabilisierung der Strömung eingetreten ist. Unabhängig von der Ursache dieser Beobachtungen, ist die mögliche Verwendung von körperangepassten Gittern ein Vorteil der SLLBM.

Die rechte Hälfte von Abb. 5.14 zeigt einen LBM-Stoßsensor nach Latt et al. [130], der ein Maß für das lokale Nichtgleichgewicht der Strömung darstellt. Er berechnet sich an jedem Gitterpunkt mittels

$$\varepsilon = \frac{1}{Q} \sum_{i=0}^Q \frac{|f_i - f_i^{\text{eq}}|}{w_i}. \quad (5.11)$$

Im Gegensatz zu Latt et al. findet die Normierung nicht mit dem Gleichgewicht  $f_i^{\text{eq}}$ , sondern mit dem jeweiligen Gewicht  $w_i$  statt. Dies hat sich für die SLLBM-Simulationen als robuster erwiesen, da  $f_i^{\text{eq}}$  aufgrund der polynomiellen Darstellung



**Abbildung 5.13:** Temperatur der Umströmung eines NACA-0012-Tragflächenprofils bei  $Ma = 1.5$  und  $Re = 10000$  zum Zeitpunkt  $t = 30$ .

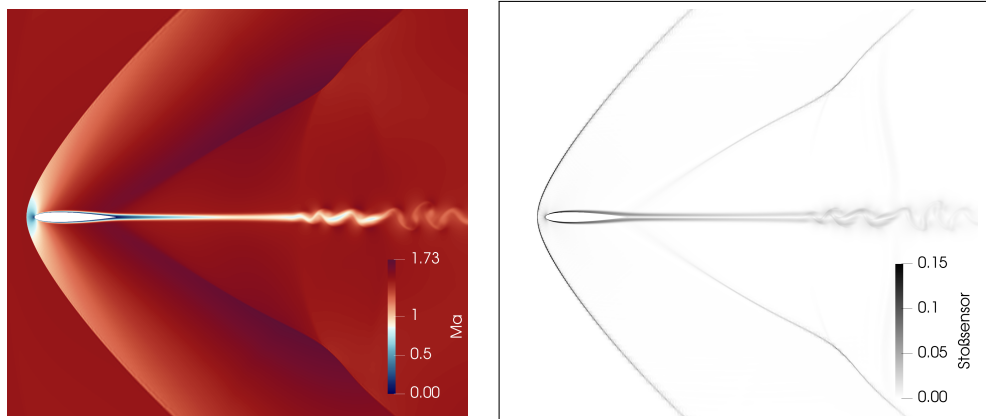
auch negative Werte aufweisen oder verschwinden kann. Wie in Abb. 5.14 zu erkennen ist, treten sowohl nahe der Stöße als auch im Bereich der Wirbelstraße erhöhte Werte des Stoßsensors  $\varepsilon$  auf. Der Stoßsensor wurde in der vorliegenden Konfiguration nicht weiter verarbeitet, da die Simulationen auch ohne künstliche Viskosität stabil blieben. Zukünftig könnte der Stoßsensor jedoch beispielsweise als Leitparameter verwendet werden, um gezielt lokale adaptive Gitterverfeinerungen vorzunehmen.

Neben der visuellen Übereinstimmung lässt sich die Qualität der Ergebnisse auch mithilfe des Verlaufs des Druckbeiwerts vor und hinter dem Tragflächenprofil sowie auf dessen Oberfläche bestätigen. Der Druckbeiwert  $C_P$  für kompressible Strömungen lautet

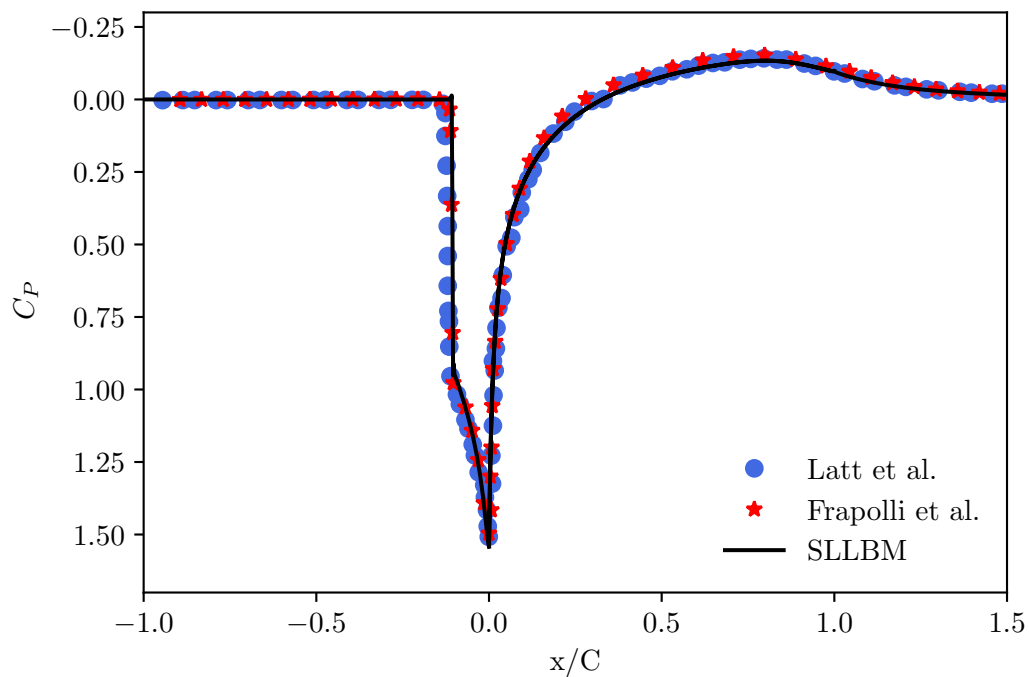
$$C_P = \frac{P - P_0}{\frac{\gamma}{2} P_0 Ma^2}. \quad (5.12)$$

Abb. 5.15 zeigt den Verlauf des Druckbeiwertes im Vergleich zu den Simulationen von Latt et al. sowie Frapolli et al.: Die Übereinstimmung mit den Referenzen ist sehr gut. Im Gegensatz zu den Ergebnissen von Latt et al. [130] zeigen sich auf dem Profil keinerlei Oszillationen des Druckbeiwertes, was ebenso den Wert des körperangepassten Gitters unterstreicht.

Alles in allem konnte mit der Simulation des NACA-0012 Tragflächenprofils gezeigt werden, dass die kompressible SLLBM mit Randbedingungen auch mit körperangepassten Gittern und Randbedingungen erfolgreich angewendet werden kann. Als



**Abbildung 5.14:** Umströmung des NACA-0012-Tragflächenprofils bei  $Ma = 1.5$  und  $Re = 10000$  zum Zeitpunkt  $t = 6.5$ . Links: Machzahl. Erkennbar ist, dass sich die initial einsetzende Wirbelstraße im weiteren Verlauf stabilisiert. Rechts: Wert des Stoßsensors.



**Abbildung 5.15:** Verlauf des Druckbeiwertes  $C_P$  vor und hinter dem Tragflächenprofil, sowie im Bereich  $x/C \in [0, 1]$  auf dessen Oberfläche. Vergleich zu Latt et al. [130] sowie Frapolli et al. [65].

nächstes werden in den kommenden Abschnitten dreidimensionale Strömungen mit der SLLBM simuliert.

## 5.4 Simulation dreidimensionaler Strömungen

### 5.4.1 Quasi-inkompressibler dreidimensionaler Taylor-Green-Wirbel

Zum Vergleich der Geschwindigkeitssätze für schwach kompressible SLLBM-Simulationen aus Kapitel 4 bietet sich der dreidimensionale Taylor-Green-Wirbel an, welcher ein standardisierter Testfall im periodischen Gebiet  $S \in [0, 2\pi]^3$  ist. Aufgrund dessen kann die Implementierung ohne Einfluss von Randbedingungen oder Körperbegrenzungen untersucht werden. Die Anfangsbedingungen für Geschwindigkeit und Druck lauten

$$\mathbf{u}(x, y, 0) = \begin{pmatrix} \sin(x)\cos(y)\cos(z) \\ -\cos(x)\sin(y)\cos(z) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

bzw.

$$P(x, y, t = 0) = \frac{1}{16}(\cos(2x) + \cos(2y))\cos(2z + 2). \quad (5.14)$$

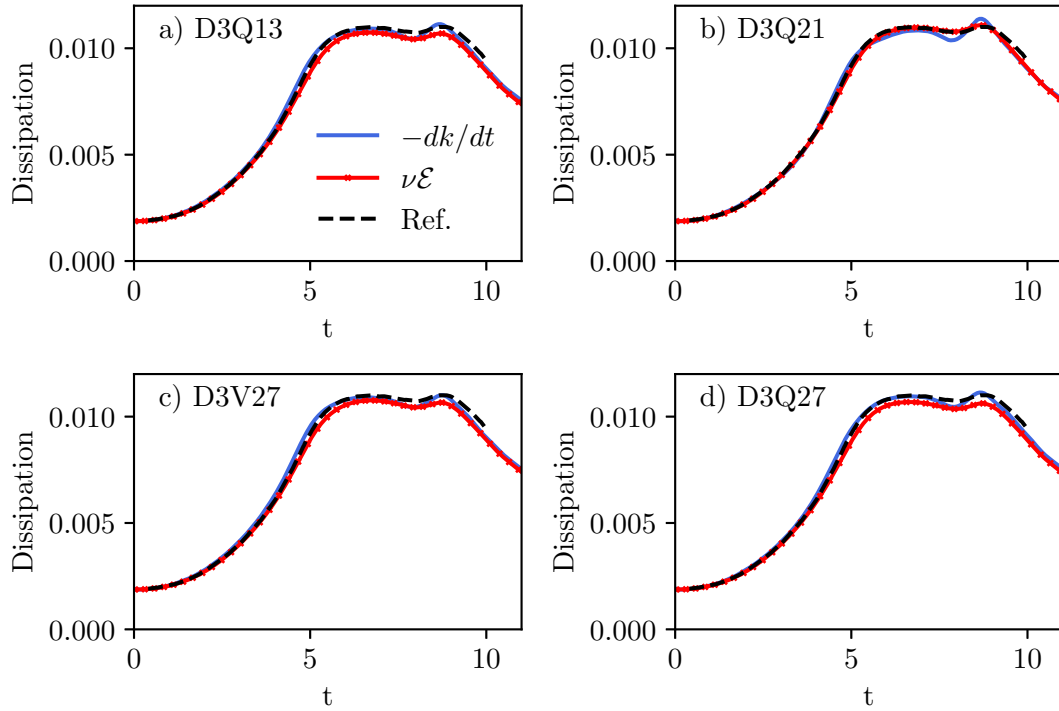
Anders als im zweidimensionalen Fall, der in den Abschnitten 2.3 bzw. 5.1.2 simuliert wurde, vermischen sich die initialen großen Wirbel rasch und zerfallen in kleinere Wirbel, sodass der Testfall im Falle von hinreichend großen Reynoldszahlen bei  $t \approx 10$  in eine nahezu isotrope Turbulenz übergeht. Die kinetische Energie des Testfalls ist folgendermaßen definiert

$$k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_S \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 d^3 \mathbf{x}. \quad (5.15)$$

Daneben ist die Enstrophie ein Maß für die Dissipation auf Basis der aufgelösten Skalen [115]

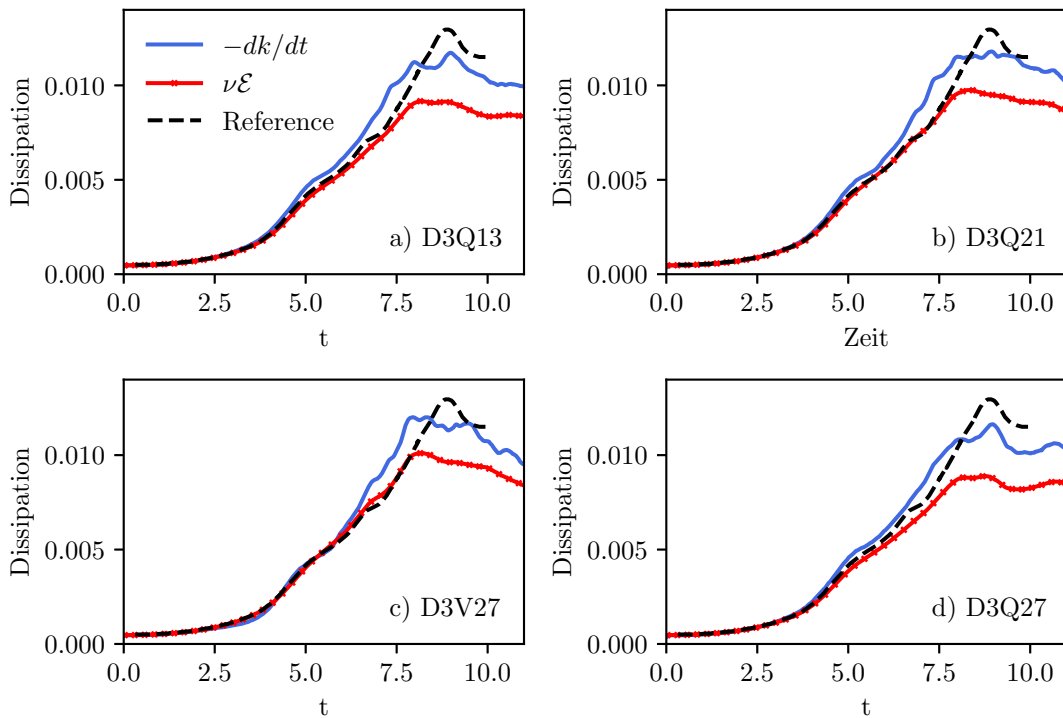
$$\mathcal{E} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_S (\nabla \times \mathbf{u})^2 d^3 \mathbf{x}. \quad (5.16)$$

Im Inkompressiblen entspricht die Dissipationsrate  $-dk/dt$  idealerweise dem Produkt aus Viskosität und Enstrophie  $\nu\mathcal{E}$ , d.h.  $-dk/dt = \nu\mathcal{E}$ . Die Ableitung wurde hierbei mit der zentralen Finite-Differenzen-Methode zweiter Ordnung berechnet. Die Visualisierung dieser beiden Größen zeigt damit den Einfluss der Numerik, die über numerischen Dissipation und Auflösung die Bilanz von Zeitschritt zu Zeitschritt beeinflussen und zu Abweichungen führen kann.



**Abbildung 5.16:** Zeitlicher Verlauf der Dissipationsrate  $-dk/dt$  und der skalierten Enstrophie  $\nu\mathcal{E}$  im Vergleich zur Referenz von Brachet et al. [21] mit verschiedenen Geschwindigkeitssätzen bei Reynoldszahl  $Re = 400$ .

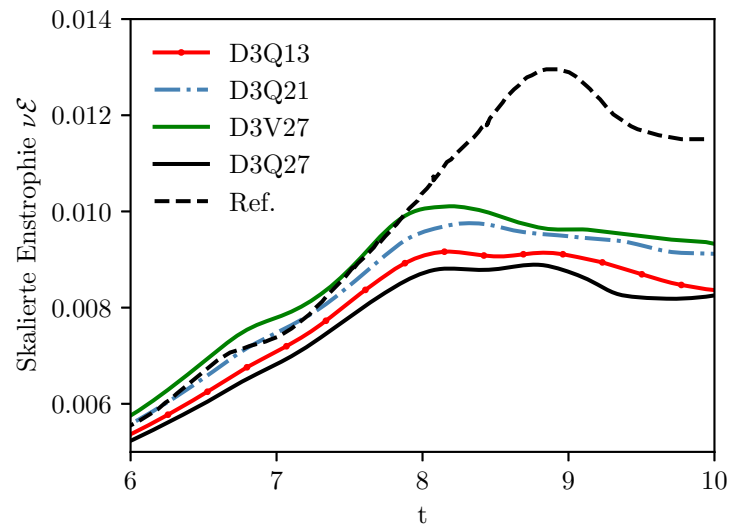
Die folgenden Simulationen wurden mit den Geschwindigkeitssätzen D2Q13, D2Q21 und D3Q27 mit  $\mathfrak{N} = 5$ , sowie dem Geschwindigkeitssatz D3V27 mit  $\mathfrak{N} = 7$  durchgeführt. Die Auflösung mit der SLLBM betrug  $N_{\Xi} = 32^3$  mit der Ordnung der Ansatzfunktionen  $p = 4$ . Im ersten Fall wurde die Reynoldszahl auf  $Re = 1600$  gesetzt. Die Zeitschrittweite aller Simulationen betrug  $\delta_t = 0.0015$ . Abb. 5.16 zeigt den zeitlichen Verlauf der Dissipationsrate sowie der skalierten Enstrophie im Vergleich zur gewählten Referenzsimulation von Brachet et al. [21]. Insgesamt stimmen beide Verläufe aller Simulationen gut mit der Referenz überein und zeigen dadurch, dass die Simulationen ausreichend aufgelöst waren. Gleichzeitig erkennt man, dass keine signifikanten Unterschiede zwischen den Ergebnissen einzelner Geschwindigkeitssätze zu beobachten sind. Im nächsten Schritt wurde die Reynoldszahl auf  $Re = 1600$  erhöht, was zur Folge hat, dass die Simulation fortan unteraufgelöst ist. Die Ergebnisse hierzu finden sich in Abb. 5.17. In allen Simulationen zeigt sich, dass der Anstieg der Dissipationsrate anfänglich zu steil ist und das Maximum der Dissipationsrate nur von D3Q13 und D3V27 gut getroffen wird. Bei der skalierten Enstrophie gibt es jedoch weitere Unterschiede, die zum besseren Vergleich in Abb. 5.18 dargestellt sind. Insgesamt stimmt hier der Geschwindigkeitssatz D3V27 mit  $\mathfrak{N} = 7$  im Bezug auf den Verlauf der Enstrophiekurve am besten mit der Referenz überein, während die



**Abbildung 5.17:** Zeitlicher Verlauf der Dissipationsrate  $-dk/dt$  und der skalierten Enstrophie  $\nu\mathcal{E}$  im Vergleich zur Referenz von Brachet et al. [21] mit verschiedenen Geschwindigkeitssätzen bei Reynoldszahl  $Re = 1600$ .

Enstrophie für D3Q27 im Vergleich am stärksten abweicht und D3Q13 sowie D3Q21 sich dazwischen platzieren.

Die Unterschiede zwischen den Geschwindigkeitssätzen können durch verschiedene Effekte erklärt werden. Einerseits ist es für interpolationsbasierte Löser wie die SLLBM günstig, wenn möglichst wenig Advektionsgleichungen gelöst werden müssen, um den numerischen Aufwand und den Interpolationsfehler zu reduzieren. Andererseits unterscheidet sich die räumliche Verteilung der Abszissen jedes Geschwindigkeitssatzes voneinander, sodass die Informationen aus verschiedenen Raumrichtungen transportiert werden. Zu guter Letzt besitzt der Geschwindigkeitssatz D3V27 mit  $\mathfrak{N} = 7$ , im Gegensatz zu den konventionellen Geschwindigkeitssätzen mit  $\mathfrak{N} = 5$ , den Vorteil der korrekten Darstellung des Spannungstensors, was zu einer weiteren Reduktion der Fehler beiträgt und die gute Übereinstimmung der Enstrophie mit der Referenz erklärt. Die SLLBM bietet somit die Möglichkeit, schlankere Geschwindigkeitssätze als die Standard-LBM einzusetzen, wobei die Geschwindigkeitssätze D3Q13 und D3Q21 ein guter Kompromiss aus Rechenzeit und Genauigkeit bei niedrigen Machzahlen sind.



**Abbildung 5.18:** Zeitlicher Verlauf der skalierten Enstrophie  $\nu\mathcal{E}$  im Zeitraum  $t \in [6; 10]$  mit verschiedenen Geschwindigkeitssätzen bei Reynoldszahl  $Re = 1600$ . Referenz von Brachet et al. [21].

### 5.4.2 Kompressibler dreidimensionaler Taylor-Green-Wirbel

Durch die Verwendung hoher Machzahlen bei der Initialisierung unterscheidet sich der kompressible dreidimensionale Taylor-Green-Wirbel wesentlich vom Testfall für schwach kompressible Strömungen. Aufgrund der großen initialen Wirbel zu Beginn treten insbesondere in der ersten Phase der Simulation Stöße und Shocklets auf [161]. Letztere bezeichnen dabei lokal begrenzte Gebiete starker Verdichtung, während Stöße sich durch starke Gradienten auszeichnen und die makroskopischen Größen den Rankine-Hugoniot-Bedingungen folgen. Die steilen Gradienten beider Typen können dabei zu Problemen bei der Stabilität des Löser führen. Ähnlich wie im inkompressiblen Fall, verwickeln sich die Wirbel der darauf folgenden Phase immer stärker und gehen in der Folge – zumindest bei ausreichend hohen Reynoldszahlen – in eine nahezu isotrope Turbulenz über. Dies wiederum erfordert, dass sich der Löser nicht zu diffusiv verhält, um möglichst viele der kleinen Skalen aufzulösen.

Ein Vorteil des Taylor-Green-Wirbels ist die deterministische Initialisierung im Vergleich zu Testfällen mit isotrop abklingender Turbulenz, bei denen das Initialfeld zwar gemäß des Energiespektrums erzeugt wird, die räumliche Verteilung über die Simulationsdomäne jedoch letztlich zufällig ist [100].

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der SLLBM für diesen Testfall mit zwei kürzlich erschienenen Arbeiten von Peng und Wang [161] sowie Lusher und Sandham [142] verglichen, die beide einen Finite-Differenzen-Löser hoher Ordnung verwendeten. Die Ergebnisse sind zwei Arbeiten von Wilde et al. [218, 221] entnommen.



Der kompressible Taylor-Green-Vortex hat die folgenden Initialbedingungen für Dichte und Temperatur  $T$

$$\rho(x, y, z, t = 0) = 1 + \frac{\mathcal{C}}{16} [\cos(2x) + \cos(2y)] [\cos(2z + 2)], \quad (5.17)$$

$$T(x, y, z, t = 0) = 1, \quad (5.18)$$

im Gebiet  $S = [0, 2\pi]^3$ . Das Geschwindigkeitsfeld ist identisch zu Gl. (5.13). Der Zähler in Gl. 5.17 ist in [161] und [142] unterschiedlich definiert. Für die Fälle mit Reynoldszahl  $Re = 400$  beträgt er  $\mathcal{C} = 1$ , für den Fall  $Re = 1600$  dagegen  $\mathcal{C} = \gamma Ma^2$ . Die Prandtlzahl und der Isentropenexponent sind mit  $Pr = 0.7$  und  $\gamma = 1.4$  festgelegt. Den Referenzen entsprechend folgt die dynamische Viskosität  $\mu$  dem Gesetz von Sutherland, welches die Temperaturabhängigkeit der Viskosität modelliert

$$\mu = \frac{1.4042T^{1.5}}{T + 0.40417} \mu_\infty. \quad (5.19)$$

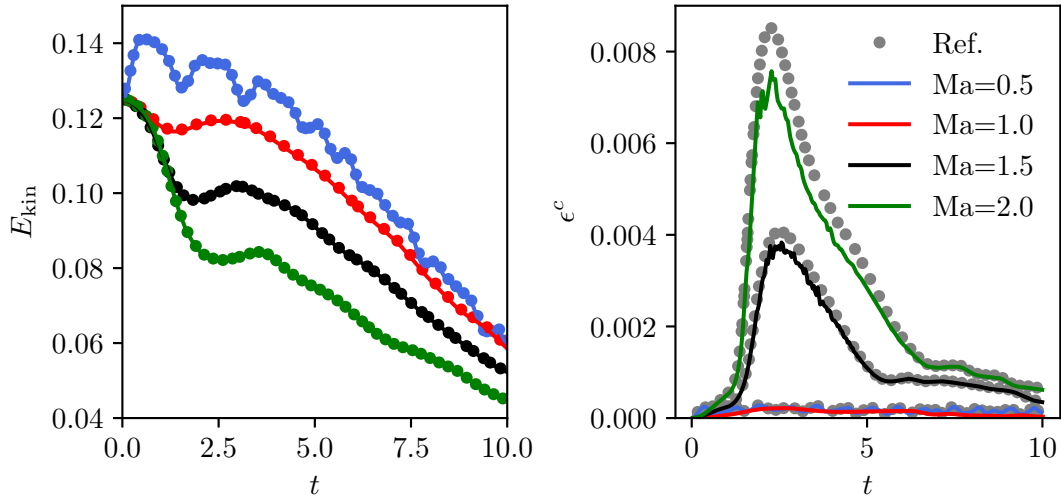
Der Ausdruck  $\mu_\infty$  bezeichnet dabei den Referenzwert der dynamischen Viskosität bei  $T = 1$ .

Die SLLBM rechnete den dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbel mit dem Kubaturbasierten D3Q45-Geschwindigkeitssatz mit  $\mathfrak{N} = 9$  und der in Kapitel 3 beschriebenen Konfiguration. Dementsprechend betrug die Expansionsordnung des Gleichgewichts in Gl. (3.9)  $N = 4$ . Die Ordnung der Finiten Elemente betrug grundsätzlich  $p = 4$  und es kamen Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen zum Einsatz. Durch den Einsatz von  $N_\Xi = 64^3$  Zellen betrug die Auflösung der Simulation durchweg  $N_{Res} = 256^3$ .

## Simulationen mit $Re = 400$

Der Fall mit  $Re = 400$  wurde von Peng und Yang detailliert untersucht [161]. Die Auflösung der Referenz betrug  $N_{Res} = 512^3$ . Die Referenz nutzte dabei das kompakte Finite-Differenzen-Schema achter Ordnung von Lele [133] zur Diskretisierung der konvektiven und diffusiven Terme, kombiniert mit einem Weighted-Essentially-Non-Oscillatory-Schema (WENO) [221] für die konvektiven Terme. Für die Zeitintegration wurde ein Runge-Kutta-Verfahren dritter Ordnung mit Total-Variance-Diminishing (TVD) eingesetzt [77, 186]. Um bei diesem Eulerschen Zeitintegrationsschema die CFL-Bedingung zu erfüllen, musste die Zeitschrittweite der Referenz mit  $\delta_t = 5 \cdot 10^{-4}$  gewählt werden. Die Machzahlen wurden mit  $Ma \in \{0.5; 1.0; 1.5; 2.0\}$  festgelegt. Die Zeitschrittweiten sind  $\delta_t = 0.017$  bei Machzahl  $Ma = 0.5$ ,  $\delta_t = 0.033$  bei  $Ma = 1.0$ ,  $\delta_t = 0.018$  bei  $Ma = 1.5$ , and  $\delta_t = 0.012$  bei  $Ma = 2.0$  und somit bis zu zwei Größenordnungen größer als die Zeitschrittweiten der Referenz [161]. Insbesondere für die Fälle  $Ma \geq 1.5$  zeigen sich in der Anfangsphase der Simulation starke Kompressionseffekte mit Stößen und Shocklets.

In Abb. 5.19 ist auf der linken Hälfte der zeitliche Verlauf der kinetischen Energie für alle Machzahlen dargestellt. Die Definition der kinetischen Energie ist identisch



**Abbildung 5.19:** Links: Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie mit der SLLBM mit D3Q45 für verschiedene Machzahlen im Vergleich zur Referenz [161]. Rechts: Zeitlicher Verlauf der Dissipationsrate durch Dilatation im Vergleich zur Referenz.

zu Gl. (5.15). Obwohl die SLLBM mit deutlich größeren Zeitschrittweiten rechnete, ist die Übereinstimmung mit der Referenz für alle Machzahlen exzellent. Bei der auf der rechten Seite von Abb. 5.19 dargestellten Dissipationsrate durch Dilatation

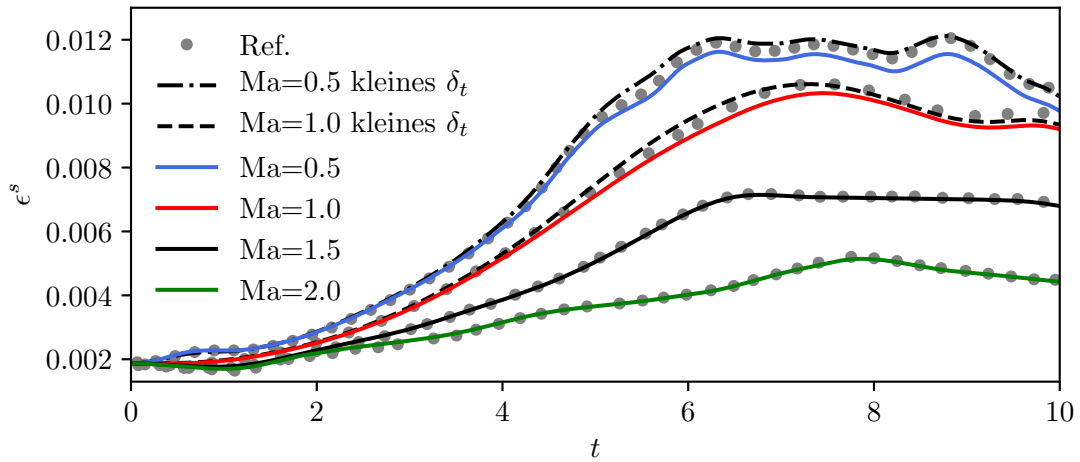
$$\epsilon^c = \frac{4}{3\rho_{\text{ref}}\text{Re}} \int_S \mu (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 d^3\mathbf{x}, \quad (5.20)$$

mit  $\rho_{\text{ref}} = 1$ , zeigten sich leichte Abweichungen der SLLBM im Vergleich zur Referenz für die hohen Machzahlen, was vermutlich durch die geringere Auflösung im Vergleich zur Referenz zu erklären ist.

Beim Verlauf der reibungsbehafteten Dissipationsrate dagegen,

$$\epsilon^s = \frac{1}{\rho_{\text{ref}}\text{Re}} \int_S \mu (\nabla \times \mathbf{u})^2 d^3\mathbf{x}, \quad (5.21)$$

zeigte sich insgesamt eine sehr gute Übereinstimmung mit der Referenz. Die Übereinstimmung konnte sogar noch verbessert werden, wenn die Zeitschrittweite für  $\text{Ma} = 0.5$  und  $\text{Ma} = 1.0$  auf  $\delta_t = 3 \cdot 10^{-3}$  verringert wurde. Dies impliziert die zeitliche Filterung der makroskopischen Größen [189], die durch die Verwendung großer Zeitschrittweiten entsteht. Um die Bedeutung der Ergebnisse für die Entwicklung eines kompressiblen LBM-Lösers einordnen zu können, wurden die Simulationen mit einem On-Lattice-Löser wiederholt. Mit Ausnahme des Strömungsschritts und der Geschwindigkeitsdiskretisierung war die Konfiguration gleich zum SLLBM-Löser. Der exakte Strömungsschritt von Gitterpunkt zu Gitterpunkt wurde mit den D3Q103- und D3V107-

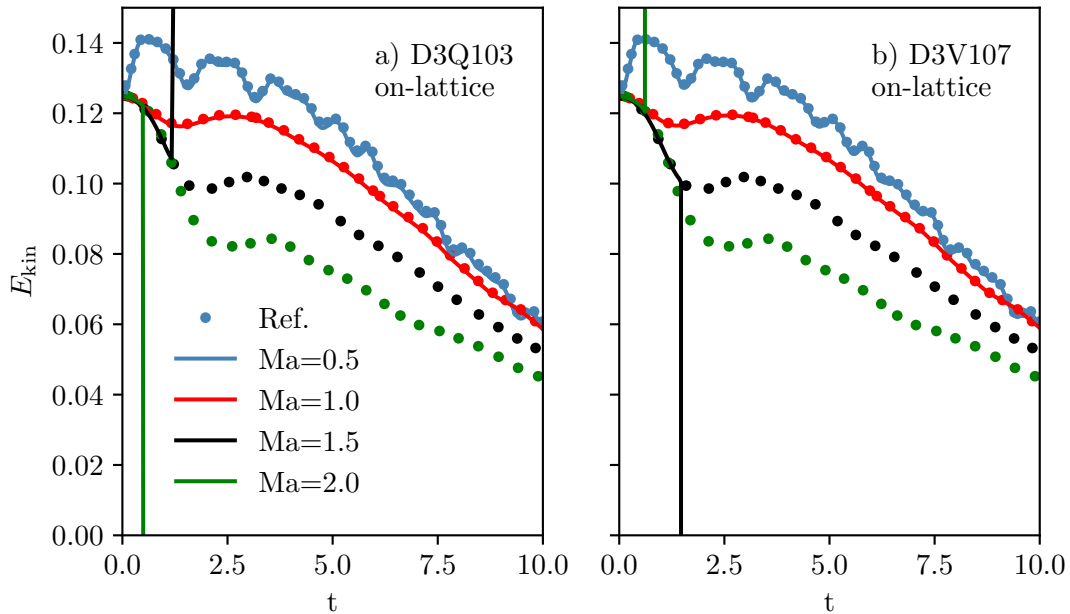


**Abbildung 5.20:** Zeitlicher Verlauf der reibungsbehafteten Dissipationsrate (5.21) der SLLBM im Vergleich zur Referenz [161]. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung, die durch eine Verringerung der Zeitschrittweite für die Fälle  $Ma = 0.5$  und  $Ma = 1.0$  noch verbessert werden konnte.

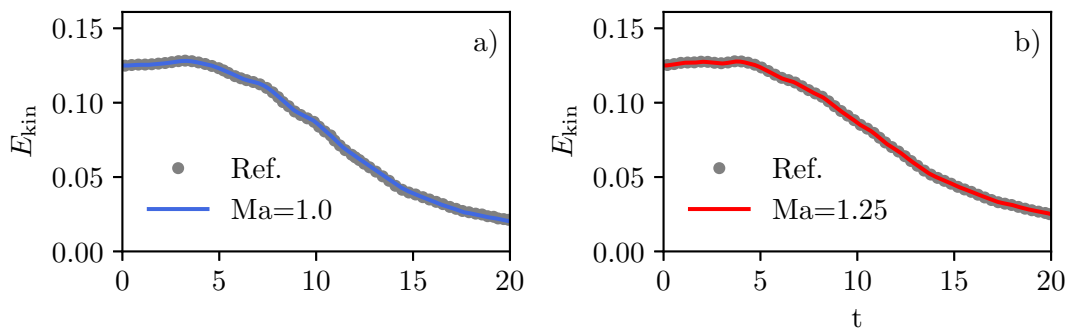
Geschwindigkeitssätzen ermöglicht. Es zeigt sich beim Vergleich der kinetischen Energie mit der Referenz von Peng und Yang in Abb. 5.21, dass nur die Simulationen mit  $Ma = 0.5$  und  $Ma = 1.0$  erfolgreich durchgeführt werden konnten, während die anderen Simulationen bald divergierten. Während die SLLBM-Simulationen oftmals durch eine Verringerung der Zeitschrittweite  $\delta_t$  stabilisiert werden konnten, so fehlt die Möglichkeit zur Änderung der Zeitschrittweite bei reinen On-Lattice-Boltzmann-Verfahren gänzlich, da sie inhärent an die räumliche Diskretisierung gebunden ist. Mit dem Ziel dennoch eine Stabilisierung zu erreichen, wurde die On-Lattice-Simulation mit der BDF2-Diskretisierung wiederholt, die in Abschnitt 2.3 erläutert wurde. Die extreme Stabilität dieser Zeitintegrationsmethode wurde in Wilde et al. demonstriert [219], allerdings scheiterte auch die BDF2 am vorliegenden Testfall. Nach den vorliegenden Erkenntnissen gibt es hierfür eine schlüssige Erklärung: Jede Geschwindigkeitsdiskretisierung verfügt über eine obere Schranke der Machzahl (s. Abschnitt 2.3), die unabhängig vom Kollisionsoperator oder der Zeitintegration mit On-Lattice-Verfahren nicht überschritten werden kann. Bei den Testfällen mit  $Ma > 1.0$  wurde diese Grenze somit offenbar verletzt, wodurch es zur Instabilität kam.

## Simulationen mit $Re = 1600$

Da beim Testfall mit  $Re = 400$  keine wirkliche isotrope Turbulenz eintritt, wurde der Testfall unter Verwendung der SLLBM nochmals mit  $Re = 1600$  und den Machzahlen  $Ma = 1.0$  sowie  $Ma = 1.25$  wiederholt. Bei dieser Reynoldszahl wird im Verlauf der Simulation eine nahezu isentrope Turbulenz erreicht. Auch in diesem Fall diente eine



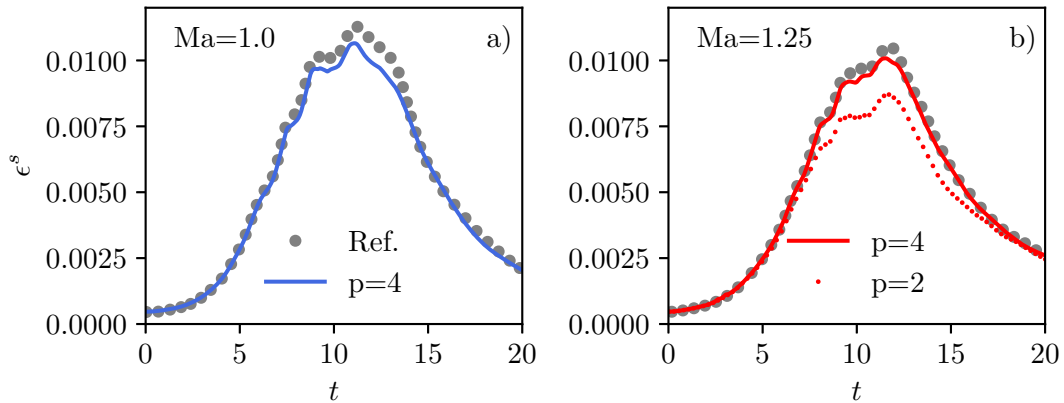
**Abbildung 5.21:** Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für zwei On-Lattice-Boltzmann-Simulationen mit a) D3Q103 und b) D3V107. Während für niedrige Machzahlen  $Ma < 1.0$  der Verlauf akkurat wiedergegeben wird, so sind die Simulationen für größere Machzahlen nicht stabil. Aus [221].



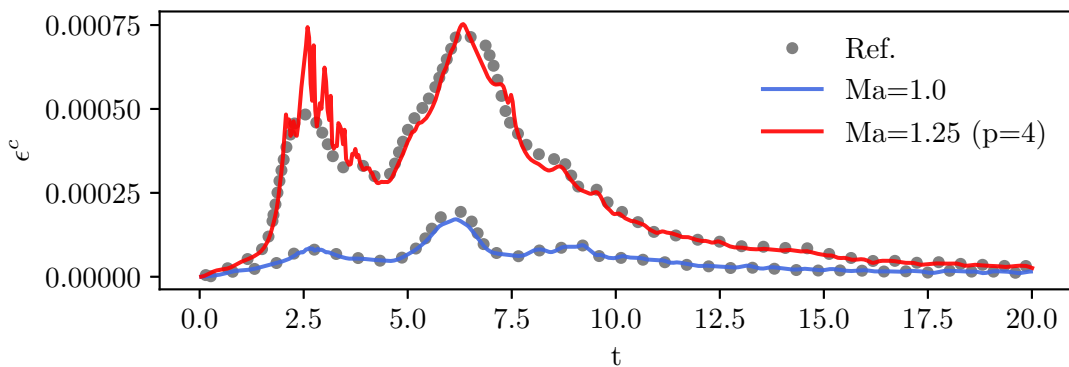
**Abbildung 5.22:** Zeitlicher Verlauf der kinetischen Energie für die SLLBM-Simulationen mit D3Q45 mit den Machzahlen a)  $Ma = 1.0$  und b)  $Ma = 1.25$ . Aus [221].

weitere, kürzlich erschienene Referenz von Lusher und Sandham als Vergleichsmöglichkeit [142].

Auch für diesen Testfall zeigte sich für den zeitlichen Verlauf der kinetischen Energie in Abb. 5.22 bei beiden Machzahlen eine hervorragende Übereinstimmung mit der Referenz [142].

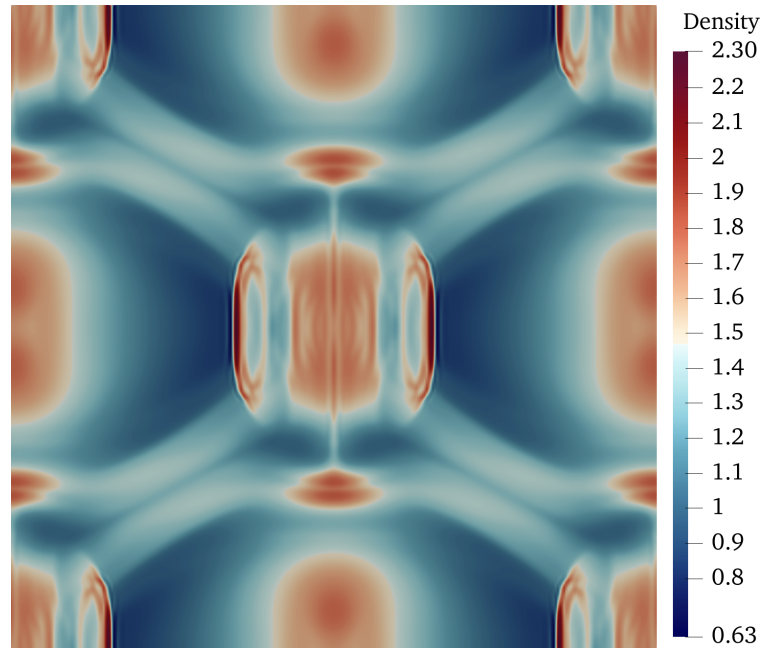


**Abbildung 5.23:** Zeitlicher Verlauf der reibungsbehafteten Dissipationsrate für die SLLBM-Simulationen mit D3Q45 mit den Machzahlen a)  $Ma = 1.0$  und b)  $Ma = 1.25$ . Aus [221].



**Abbildung 5.24:** Zeitlicher Verlauf der Dissipationsrate durch Dilatation für die SLLBM-Simulationen mit D3Q45 mit den Machzahlen a)  $Ma = 1.0$  und b)  $Ma = 1.25$ . Aus [221].

Dies gilt in ähnlichem Maße auch für die reibungsbehaftete Dissipationsrate, welche in Abb. 5.23 dargestellt ist, wenngleich die Abweichung für  $Ma = 1.0$  größer ist als für  $Ma = 1.25$ . Bei einer Verringerung der Ordnung der finiten Elemente von  $p = 4$  auf  $p = 2$  bei gleicher Auflösung  $N_{\text{Ref}} = 256^3$  zeigt sich außerdem in Abb. 5.23b), dass die hohe Ordnung für eine akkurate Reproduktion der Gradienten der makroskopischen Größen von entscheidender Bedeutung ist. Zuletzt lohnt sich auch Blick auf die Dissipationsrate durch Dilatation (5.20), deren Verlauf in Abb. 5.24 dargestellt ist. Bei der Simulation mit  $Ma = 1.0$  wird der Verlauf im Vergleich zur Referenz nahezu exakt wiedergegeben. Im Falle der leicht erhöhten Machzahl  $Ma = 1.25$  sind in der initialen Phase der Simulation starke Schwankungen der Dissipationsrate zu beobachten.

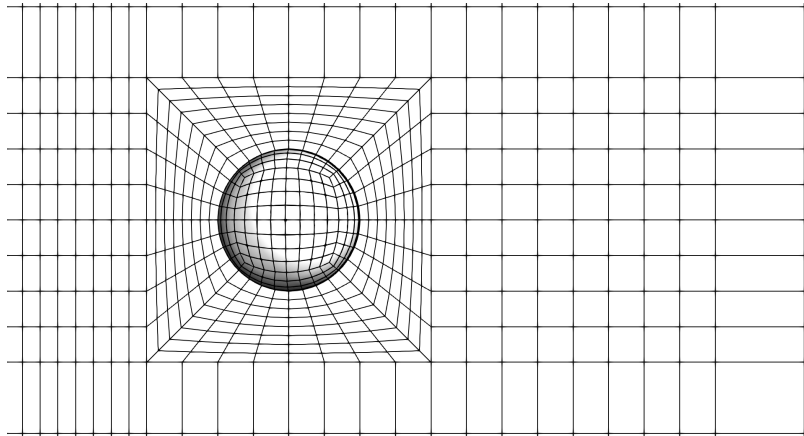


**Abbildung 5.25:** Dichte des dreidimensionalen Taylor-Green-Wirbels mit  $Re = 1600$  und Machzahl  $Ma = 1.25$  zur Zeit  $t = 3.34$ . Dargestellt ist die  $x$ - $z$ -Ebene an der Position  $y = \pi$ . Aus [221].

Zur Verdeutlichung der Vorgänge in der Startphase der Simulation ist ein Schnitt der Simulationsdomäne in Abb. 5.25 abgebildet. Hier wurde exemplarisch die Dichte visualisiert. Durch die große Machzahl bilden sich hier Stöße aus, die in guter Annäherung den Rankine-Hugoniot-Stoßbedingungen folgen. Da der benutzte Löser nicht von Mitteln des Filterns oder der künstlichen Viskosität Gebrauch macht, ist zu vermuten, dass die Konfiguration bei starken Stößen zu Oszillationen führen kann. Dennoch konnte die Simulation stabil zu Ende gerechnet werden und der weitere Verlauf der Dissipationsrate durch Dilatation genau wiedergegeben werden.

### 5.4.3 Super- und transsonische Kugelanströmung

Ein 3D-Testfall mit Festkörperrandbedingungen ist die super- bzw. transsonische Anströmung einer Kugel. Die folgenden Ergebnisse sind bisher unveröffentlicht. Zur Simulation wurde mit *Deal.II* ein körperangepasstes Netz entlang einer Kugel mit Radius  $R = 0.5$  erzeugt, welches sich in das umliegende kartesische Gitter einfügt [95]. Ein Ausschnitt des Netzes ist in Abb. 5.26 dargestellt. Der Kugelmittelpunkt befindet sich im Koordinatenursprung und die Domäne hat die Größe  $x \in [-2, 8]$ ,  $(y, z) \in [-5, 5]$ . Der Umfang der Kugel ist mit 128 Gitterpunkten aufgelöst, während sich der erste Gitterpunkt des Fluids in radialer Richtung bei  $r^+ = 0.01$ , bezogen auf die Kugeloberfläche, befindet. Für alle Ränder mit Ausnahme des Auslasses wurden Gleich-

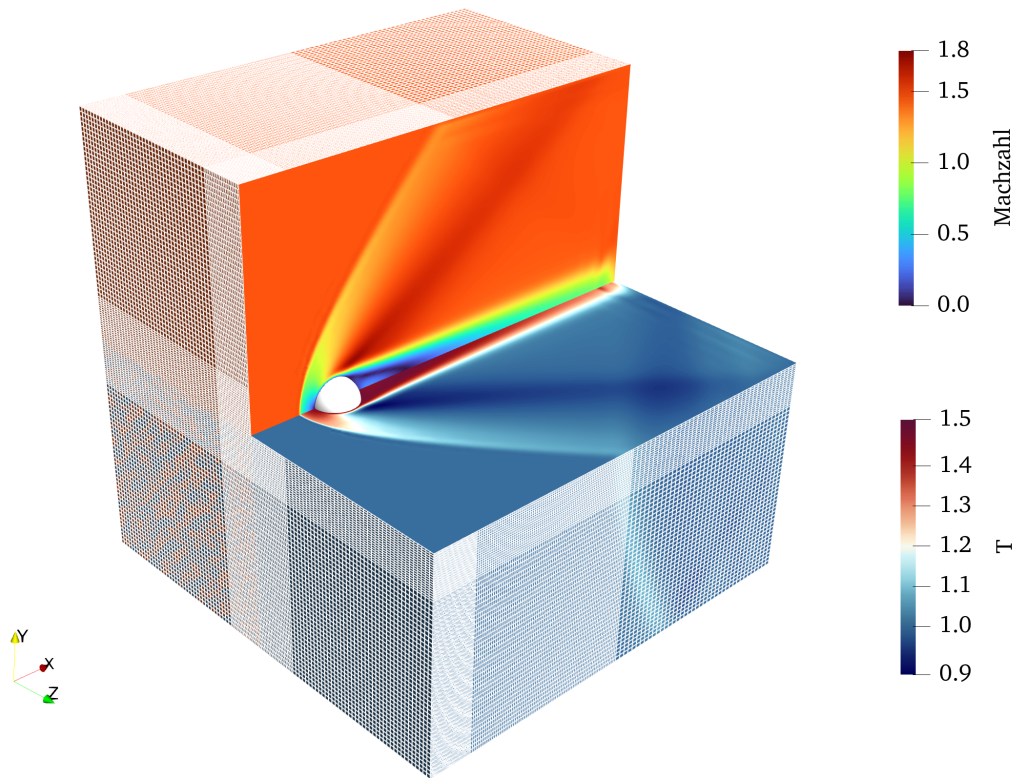


**Abbildung 5.26:** Ausschnitt des numerischen Netzes zur supersonischen Kugelströmung. Dargestellt ist die x-y-Ebene bei  $z = 0$ , sowie das Netz entlang der Kugeloberfläche. Für die eigentlichen Simulationen wurde das Netz weiter verfeinert.

gewichtsrandbedingungen mit vorgegebener Dichte  $\rho = 1$ , Temperatur  $T = 1$  und der jeweiligen Machzahl der Simulation  $Ma$  verwendet, für den Auslass kamen Auslassrandbedingungen aus Abschnitt 3.4.3 zum Einsatz. Der Isentropenexponent wurde mit  $\gamma = 1.4$  und die Prandtlzahl mit  $Pr = 0.71$  festgelegt. Die Reynoldszahl betrug  $Re = 300$ , womit die Strömung bei einer Machzahl von  $Ma = 1.5$  gerade noch dem Kontinuumsbereich zugeordnet werden kann, was an der Knudsenzahl  $Kn = \sqrt{\gamma\pi/2} Ma/Re = 0.007$  abzulesen ist. Der Geschwindigkeitsraum wurde mit dem D3Q45-Geschwindigkeitssatz diskretisiert. Die Ordnung der finiten Elemente betrug  $p = 4$ . Für die Simulationen kamen jeweils 1.38 Millionen Gitterpunkte zum Einsatz. Die Zeitschrittweite betrug  $\delta_t = 0.0084$  bei  $Ma = 1.5$ .

In Abb. 5.27 sind die Machzahl sowie die Temperatur zum Zeitpunkt  $t = 30$  abgebildet. Gut zu erkennen sind der abgesetzte Stoß, sowie der erhitzte Nachlauf der Strömung. Aufgrund der niedrigen Reynoldszahl ist der Nachlauf stabil, wie auch von Nagata et al. [152, 153] beobachtet. Am Auslass bilden sich geringfügig Wellen, die sich durch die recht einfach gestaltete Auslassrandbedingung aus Abschnitt 3.4.3 erklären lassen. Durch Verwendung charakteristischer Randbedingungen [96] wird sich dieser Effekt vermutlich verringern lassen.

Zur Validierung der Ergebnisse wurde der Abstand des Stoßes von der Kugeloberfläche gemessen, was in Abb. 5.28 aufgeführt ist. Die Abstände der Stöße stimmen insgesamt besser mit der Literatur überein als die Ergebnisse von Latt und Coreixas [130], welche die Kugel lediglich mit einer gestuften Randbedingung approximierten und trotz einer deutlich größeren Auflösung von 8 Millionen Gitterpunkten den Abstand des Stoßes tendenziell zu groß ermittelten. Dennoch weist auch die SLLBM für größere Machzahlen Abweichungen von den Literaturwerten auf, die jedoch experimentell



**Abbildung 5.27:** Machzahl (x-y-Ebene) und Temperatur (x-z-Ebene) der Umströmung einer Kugel bei Machzahl  $Ma = 1.5$ . Unter den Schnittebenen ist das Gitter dargestellt.

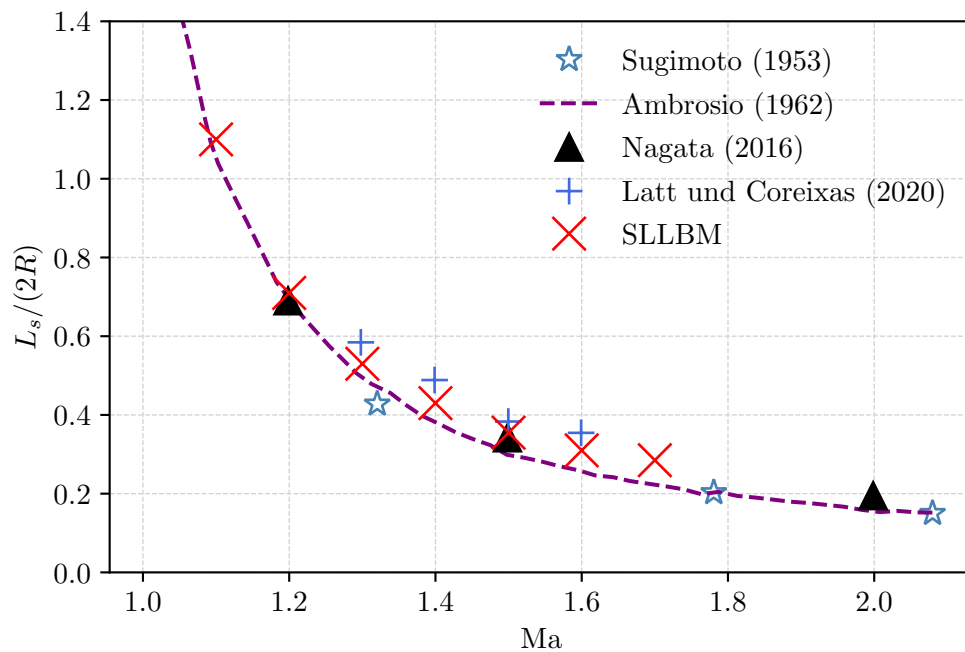
ermittelt wurden. Die Übereinstimmung mit den numerisch gemessenen Werten von Nagata et al. ist hingegen besser. Simulationen mit Einlaufmachzahlen  $Ma \geq 1.8$  waren mit der SLLBM in der gegebenen Konfiguration instabil, was sich damit erklären lässt, dass die auftretenden Machzahlen aufgrund von Beschleunigungseffekten wesentlich höher sind als  $Ma \approx 2.0$ .

Im nächsten Schritt wurde die Reynoldszahl auf  $Re = 1000$  erhöht. Weil die Wirbelstraße für höhere Machzahlen rasch verschwindet (vgl. [152]), wurde die Machzahl auf  $Ma = 1.05$  verringert, womit sich die Konfiguration im transsonischen Bereich befindet. Hierzu wurde die Auflösung der Kugeloberfläche auf  $r^+ = 0.005$  verdoppelt und die Domänengröße wurde auf  $x \in [-4, 12]$ ,  $(y, z) \in [-8, 8]$  vergrößert, wodurch sich auch die Anzahl der Gitterpunkte auf 10.9 Millionen erhöhte. Die Zeitschrittweite wurde auf  $\delta_t = 0.003$  verringert.

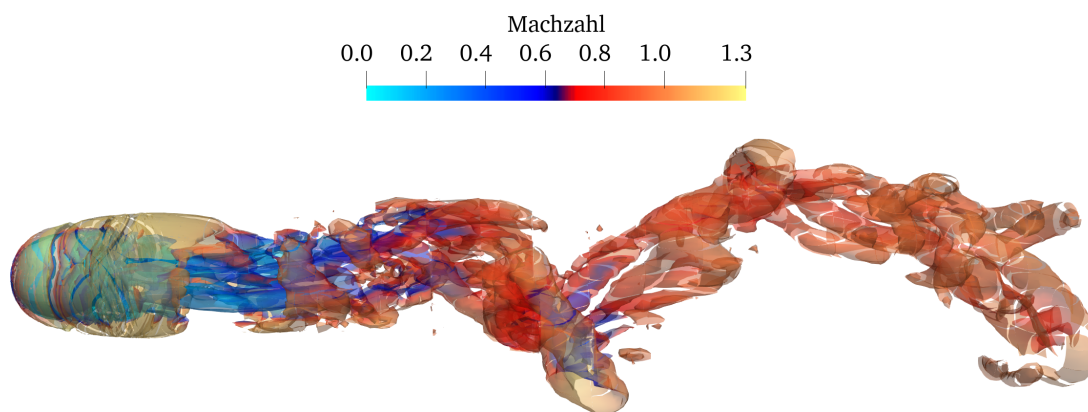
In Abb. 5.29 ist die Isokontur des Q-Kriteriums bei  $\hat{Q} = 0.0005$  zum Zeitpunkt  $t = 24.6$  dargestellt. Die sich ausbildende Wirbelstraße mit relativ langen Wirbelschläuchen ist klar zu erkennen und entspricht qualitativ der Abbildung in Nagata et al. [152].

Zur weiteren Validierung des Lösers zur Simulation dreidimensionaler, kompressibler

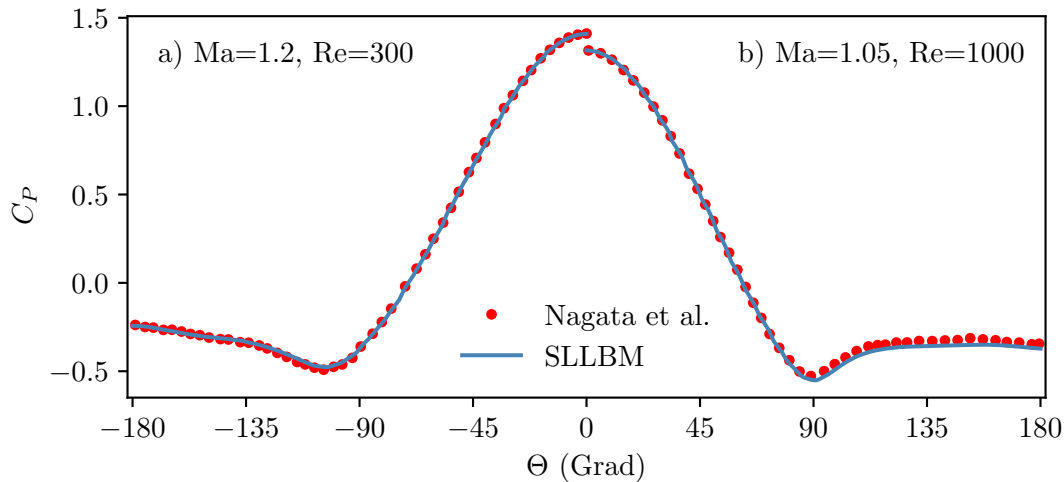




**Abbildung 5.28:** Abstände des Stoßes von der Kugeloberfläche mit der SLLBM bei  $Re = 300$  im Vergleich mit Sugimoto [97], Ambrosio [3], Nagata [153] sowie Latt und Coreixas [130].



**Abbildung 5.29:** Transsonische Kugelanströmung bei  $Ma = 1.05$  und  $Re = 1000$  zum Zeitpunkt  $t = 24.6$ . Dargestellt ist die Isokontur des  $Q$ -Kriteriums bei  $\hat{Q} = 0.0005$ , eingefärbt mit der Machzahl.



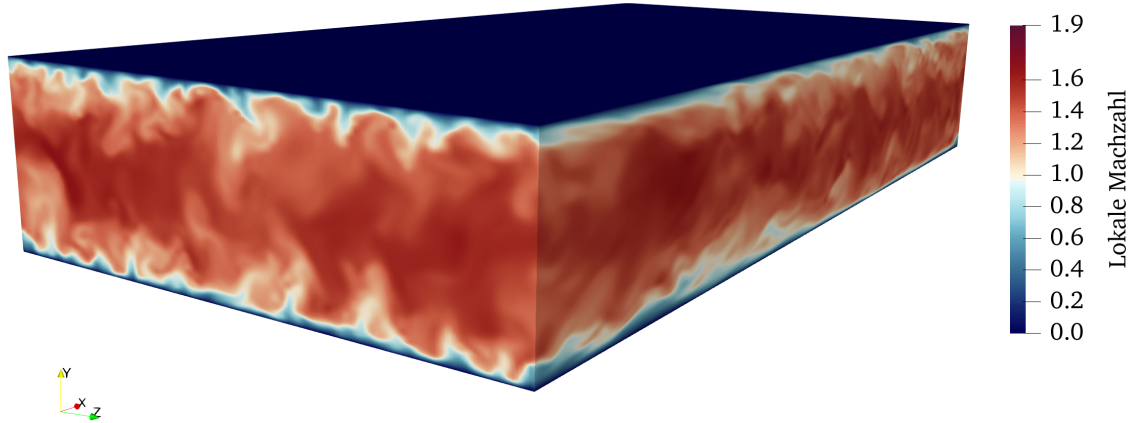
**Abbildung 5.30:** Verlauf des Druckbeiwertes  $C_P$  entlang der Kugeloberfläche für  $Ma = 1.2, Re = 300$  (links) und  $Ma = 1.05, Re = 1000$  (rechts). Referenz von Nagata et al. [152].

Probleme kann der Druckkoeffizient  $C_P$  entlang der Kugeloberfläche herangezogen werden, welcher in Abb. 5.30 für die Fälle  $Ma = 1.2, Re = 300$  und  $Ma = 1.05, Re = 1000$  dargestellt ist. Sowohl für den ersten Fall mit  $Re = 300$  als auch für die Simulation mit  $Re = 1000$  zeigt sich eine exzellente Übereinstimmung mit der Referenz über die gesamte Kugeloberfläche und ein glatter Verlauf des Druckkoeffizienten.

Zur Abschätzung des Rechenbedarfs der kompressiblen SLLBM können folgende Werte einen Anhalt geben. Die Simulation wurde auf dem OMNI-Cluster der Universität Siegen durchgeführt. In diesem Fall kamen 16 Knoten mit je zwei CPUs des Typs AMD EPYC 7452 mit je 32 Kernen und 128 MB Cache zum Einsatz. Jeder Knoten ist mit 256 GB DDR4-RAM ausgestattet. Für die Simulation bis  $t = 75$  und ca. 25200 Zeitschritten benötigte die Simulation mit der angegebenen Konfiguration ungefähr 14 Stunden Rechenzeit. Dies entspricht 5.27 Millionen Aktualisierungen von Gitterpunkten pro Sekunde.

#### 5.4.4 Supersonische Kanalströmung

Abschließend wurde zum ersten Mal in der LBM-Literatur eine supersonische Kanalströmung bei globaler Machzahl  $Ma_b = 1.5$  untersucht. Vergleichbare Strömungssituationen wie in diesem Testfall finden sich beispielsweise im Einlass von supersonischen Flugzeugtriebwerken [63]. Die folgenden Ergebnisse sind bisher ebenfalls unveröffentlicht. Das Strömungsgebiet betrug  $[0, 4\pi], [0, 2], [0, 2\pi]$  und wurde mit  $512 \times 256 \times 256$  Gitterpunkten mit Ordnung der finiten Elemente  $p = 4$  diskretisiert, was insgesamt 33.6 Millionen Gitterpunkten entspricht. Die Wände befanden sich bei  $y = 0$  und  $y = 2$ ,



**Abbildung 5.31:** 3D-Ansicht des supersonischen Kanals. Dargestellt ist die lokale Machzahl.

während periodische Ränder in  $x$ - und  $z$ - Richtung vorgegeben wurden. Das Gitter wurde ausgehend von der Kanalmitte in  $y$ -Richtung zunehmend gestaucht, um die Gradienten an der Wand bestmöglich erfassen zu können. Der erste Gitterpunkt in  $y$ -Richtung befand sich dadurch bei  $y = 0.0009$ , was dem Wert  $y^+ = 0.25$  entspricht. Als Diskretisierung des Geschwindigkeitsraums wurde der D3Q45-Geschwindigkeitssatz verwendet.

Eine 3D-Ansicht des Kanals ist in Abb. 5.31 abgebildet und vermittelt anhand der lokalen Machzahl einen Eindruck über die Strömung im Kanal.

Die gemittelte Dichte  $\rho_b$  und der gemittelte Impuls  $\rho_b u_b$  lassen sich durch

$$\rho_b = \frac{1}{2\delta_c} \int_0^2 \langle \rho \rangle dy, \quad \rho_b u_b = \frac{1}{2\delta_c} \langle \rho u_x \rangle dy \quad (5.22)$$

berechnen. Hierbei bezeichnet  $\delta_c = 1$  den halben Wandabstand. Die globale Reynoldszahl bzw. Machzahl des Testfalls beträgt

$$\text{Re}_b = \frac{\rho_b u_b \delta_c}{\mu_w} = 3000, \quad \text{Ma}_b = \frac{u_b}{c_w}, \quad (5.23)$$

unter Berücksichtigung der Schallgeschwindigkeit  $c_w$  und der dynamischen Viskosität  $\mu_w$  jeweils an der Wand. Im Folgenden bezeichnet der Index  $w$  stets die Werte an den Wänden des Kanals.

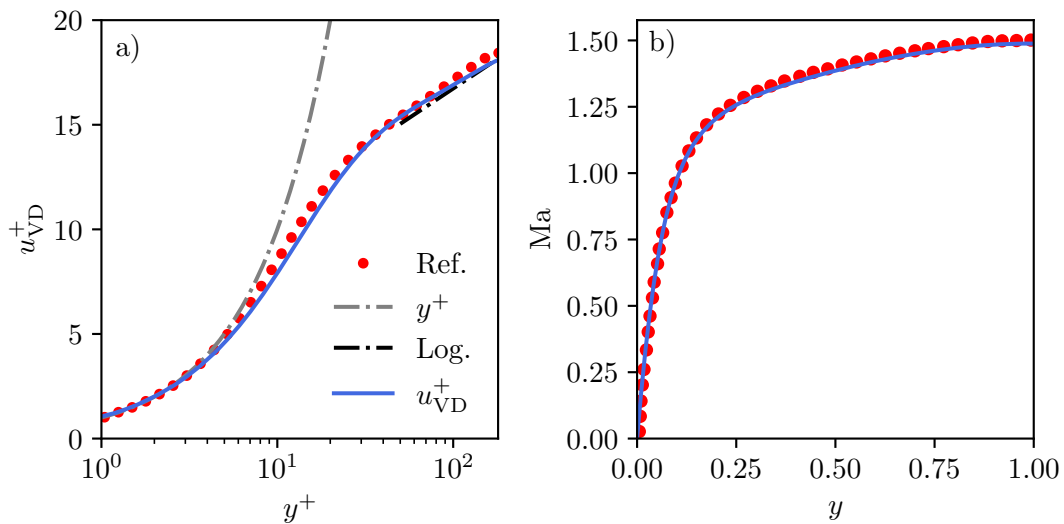
Die dynamische Viskosität folgt einem Potenzgesetz der Form

$$\mu = \mu_w \left( \frac{T}{T_w} \right)^{0.7}. \quad (5.24)$$

Der Isentropenexponent ist mit  $\gamma = 1.4$  und die Prandtlzahl mit  $Pr = 0.7$  festgelegt, womit die Konfiguration vergleichbaren Referenzen [37, 63, 87, 173] entspricht.

Zur Initialisierung des Testfalls wurden bei initialer Machzahl  $Ma_b(t = 0) = 1.0$  und niedriger Auflösung zunächst große Moden in alle Raumrichtungen von hochfrequenten Störungen überlagert und diese dann mit einem parabolischen Geschwindigkeitsprofil in Abhängigkeit der  $y$ -Richtung kombiniert. Nach einer Einschwingzeit wurde die Strömung auf die Zielmachzahl  $Ma_b(t \rightarrow \infty) = 1.5$  beschleunigt. Diese Startphase von 100000 Zeitschritten wurde mit einem groben Gitters mit  $128 \times 64 \times 64$  Gitterpunkten durchgeführt, während der die Transition zu Turbulenz stattfand. Danach wurden die Verteilungsfunktionswerte in zwei Schritten durch Interpolation auf das finale Gitter übertragen. Nach anschließenden weiteren 200000 Zeitschritten auf dem finalen Gitter wurde die Erfassung und Mittelung der Variablen über weitere 80000 Zeitschritte ausgeführt. Die Zeitschrittweite betrug  $\delta_t = 0.0008u_b/\delta_c$  auf dem finalen Rechengitter.

Aufgrund der Interpolation des SLLBM-Strömungsschritts trat in jedem Zeitschritt ein geringfügiger Masseverlust von ca. 0.0001% auf, der jedoch für die Gesamtlaufzeit der Simulation nicht zu vernachlässigen ist. Um die Gesamtmasse langfristig dennoch konstant zu halten, wurden sämtliche Verteilungsfunktionen der Simulation alle zehn Zeitschritte mit dem Faktor  $\rho_b(t = 0)/\rho_b(t > 0)$  skaliert. Der Druckgradient in  $x$ -



**Abbildung 5.32:** a): Van-Driest-transformierte Geschwindigkeit  $u_{vD}^+$  über  $y^+$ . „Log.“ bezeichnet das logarithmische Wandgesetz. Referenz von Ruby und Foyysi [173]. b): Gemittelte lokale Machzahl über den Verlauf der halben Kanalhöhe. Referenz von Foyysi [62].

Richtung wurde initial mit einer Volumenkraft

$$F_x = \rho \frac{\Delta \mathbf{u}}{\delta_t} = \frac{\rho_w \text{Re}_\tau^2 \mu_w^2}{\delta_c^3} \quad (5.25)$$

abgeschätzt und zur Simulationslaufzeit mittels eines PI-Reglers variiert, sodass der gemittelte Massenstrom (5.22) konstant gehalten wurde. Hierzu kam das LBM-Kräftechema von Kupershtokh zum Einsatz [123], bei dem die Beschleunigung eines Zeitschritts  $\Delta \mathbf{u}$  mittels Differenz zweier Gleichgewichtsfunktionen nach Durchführung des Kollisionsschrittes in die Verteilungsfunktionen eingebracht wird

$$\Delta f_i = f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}, T) - f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T). \quad (5.26)$$

Die Wände des Kanals sind konstant auf den Wert  $T_w$  gekühlt, wohingegen sich das Fluid durch die Reibung und Kompression aufheizt und sich nach hinreichend langer Zeit ein Gleichgewicht der gemittelten Temperatur einstellt.

Neben der globalen Reynoldszahl  $\text{Re}_b$  ist mit  $\text{Re}_\tau$  die Schubspannungsreynoldszahl definiert

$$\text{Re}_\tau = \frac{\rho_w u_\tau \delta_c}{\mu_w}, \quad (5.27)$$

die von der Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_w}$  und der Wandschubspannung

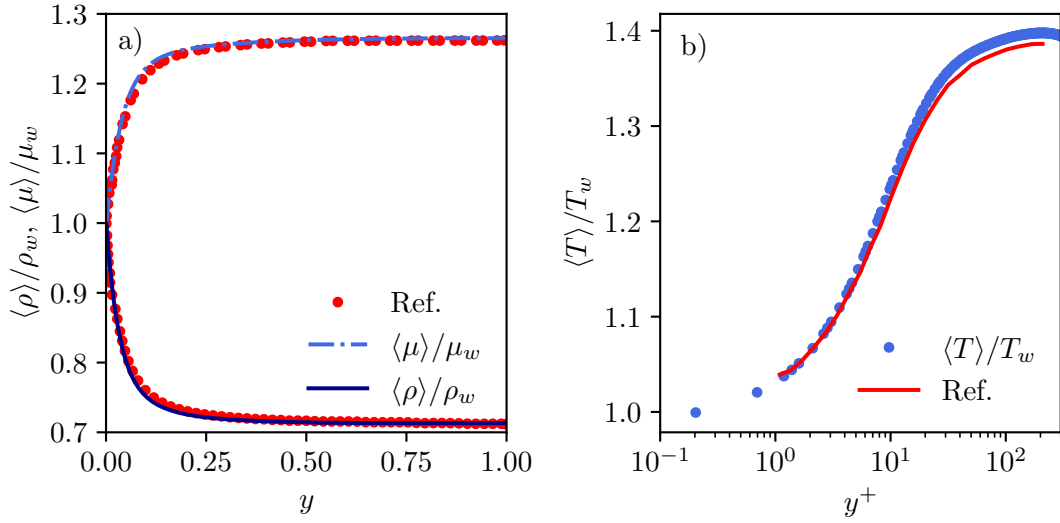
$$\tau_w = \mu_w \left\langle \frac{\partial u_x}{\partial y} \Big|_{y=0} \right\rangle \quad (5.28)$$

abhängt. Durch die gemittelten Werte der Simulation wurde eine Schubspannungsreynoldszahl von  $\text{Re}_\tau = 220.59$  gemessen, was mit den Werten in der Literatur übereinstimmt, die meist mit  $\text{Re}_\tau = 221$  angegeben werden. Die Längenskala  $l^+ = \mu / (\rho_w u_\tau)$  dient in den folgenden Abbildungen der Normierung aller mit „+“ gekennzeichneten Ortsvariablen, wie z.B.  $y^+$ . Die Geschwindigkeiten  $u_\alpha^+$  werden hingegen mit  $u_\tau$  normiert.

Die van-Driest-Transformation  $u_{\text{vD}}^+$  berücksichtigt die Dichteveriation senkrecht zur Wand bei der Berechnung der gemittelten Geschwindigkeiten

$$u_{\text{vD}}^+ = \int_0^{u^+} \frac{\langle \rho \rangle}{\langle \rho_w \rangle} du^+. \quad (5.29)$$

Die Van-Driest-transformierte Geschwindigkeit über  $y^+$  ist in Abb. 5.32a) dargestellt. Hier wird die viskose Unterschicht mit  $u_{\text{vD}}^+ = y^+$  gut wiedergegeben. Es zeigt sich darüber hinaus eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Ruby und Foyssi [173], wenn auch mit kleinen Abweichungen im Bereich  $y^+ \approx 10$ . Diese Abweichungen können allgemein auf die recht simpel konstruierten Temperaturrandbedingungen



**Abbildung 5.33:** a): Gemittelte dynamische Viskosität und Dichte normiert mit den jeweiligen Werten an der Wand im Verlauf der halben Kanalhöhe verglichen mit Ruby und Foysi [173]. b): Gemittelte Temperatur in Wandnähe im Vergleich zu den Werten von Modesti und Pirozzoli [149].

zurückgeführt werden, bei denen der Fehler der Temperatur am Rand nicht vernachlässigbar ist. Im weiteren Verlauf von  $y^+$  wird auch das logarithmische Wandgesetz  $u^+(y^+) = \ln(y^+)/0.41 + 5.5$  von der van-Driest-transformierten Geschwindigkeit erfasst. Abb. 5.32b) zeigt ferner die sehr gute Übereinstimmung der lokalen Machzahl über die halbe Kanalbreite im Vergleich zu Foysi [62].

Abb. 5.33a) stellt die temperaturabhängige dynamische Viskosität sowie die Dichte jeweils im Verhältnis zu den Werten an der Wand dar. Auch hier stimmen die Werte mit den Werten von Ruby und Foysi weitgehend überein. Bei näherer Betrachtung der Werte in der Nähe der Wand in Abb. 5.33b) wird jedoch deutlich, dass die Temperaturwerte geringfügig zu stark ansteigen. Es wird aber auch deutlich, dass der Temperaturgradient an der Wand sehr steil ist und dass die Genauigkeit der Simulation durch eine engmaschiges Netz in Wandnähe stark profitiert.

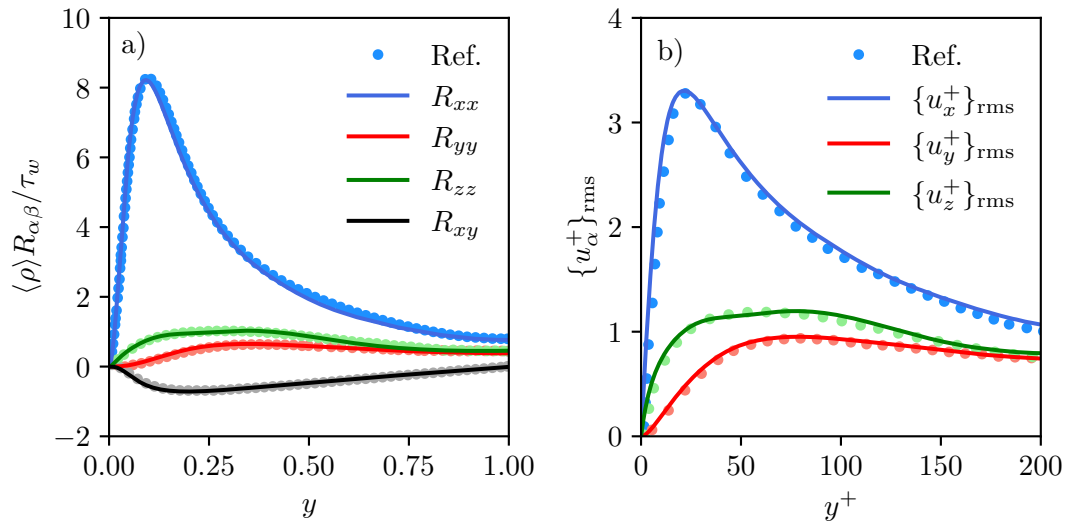
Abschließend sind in Abb. 5.34a) ausgewählte Einträge des Reynolds-Spannungstensors aufgetragen. Der Reynolds-Spannungstensor  $R_{\alpha\beta}$  wird für kompressible Strömungen in dieser Arbeit durch

$$R_{\alpha\beta} = \overline{u_\alpha u_\beta} - \tilde{u}_\alpha \tilde{u}_\beta \quad (5.30)$$

definiert. Hierzu wird die Favre-Mittelung verwendet, die mit

$$u_\alpha = \tilde{u}_\alpha + u''_\alpha, \quad \tilde{u}_\alpha = \langle \rho u_\alpha \rangle / \langle \rho \rangle, \quad \langle \rho u''_\alpha \rangle = 0 \quad (5.31)$$

definiert ist. Auch in diesem Fall werden die Werte der Referenz von Ruby und Foysi [173] akkurat durch die SLLBM-Simulation wiedergegeben. Zum selben Schluss



**Abbildung 5.34:** a): Ausgewählte Einträge des Reynolds-Spannungstensors im Vergleich zur Referenz von Ruby und Foysi [173]. b): RMS-Werte der normierten Geschwindigkeiten  $u_\alpha^+$  im Vergleich zu den Werten von Foysi [62].

kommt man bei näherer Begutachtung der RMS-Werte der normierten Geschwindigkeiten  $u_\alpha^+$  in der Nähe der Wand in Abb. 5.34b) mit beinahe perfekter Übereinstimmung mit den Referenzwerten.





# 6 Diskussion und Zusammenfassung

---

*„Die Erfahrung wächst durch fortschreitende Anpassung der Gedanken an die Tatsachen.“*

– Ernst Mach

Dieses abschließende Kapitel dient zunächst der Zusammenfassung der Arbeit. Im Anschluss werden die Ergebnisse aus dem vorherigen Kapitel diskutiert und der Bezug zu anderen Arbeiten zu kompressiblen LBM hergestellt. Die Arbeit schließt dann mit einem Fazit.

## 6.1 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung und anschließende Bewertung einer Semi-Lagrangischen Lattice-Boltzmann-Methode (SLLBM) für kompressible Strömungen. Hierzu wurde beantwortet, wie ein kompressibles SLLBM-Modell definiert werden kann, wie effiziente Geschwindigkeitssätze hergeleitet werden können und final sollte die Leistungsfähigkeit des Modells untersucht werden. Diese Fragestellungen wurden nacheinander in den Kapiteln 3 bis 5 bearbeitet und die Erkenntnisse werden nun nochmals zusammengefasst.

In Kapitel 2 wurde die zugrunde liegende Boltzmann-Gleichung erläutert und die drei wesentlichen Schritte zur Herleitung der LBM diskutiert. Im anschließenden Kapitel 3 wurde eine Sichtung und Kategorisierung der vorgeschlagenen LBM für kompressible Strömungen durchgeführt. Es folgte die Entwicklung einer SLLBM für kompressible Strömungen. Die hier vorgeschlagene kompressible SLLBM basiert wie die Standard-LBM auf einer Hermite-Expansion hoher Ordnung der Maxwell-Boltzmann-Verteilung und nutzt Kubatur-basierte Geschwindigkeitssätze hohen Grades, sodass alle konservativen Größen – Dichte, Impuls, und Energie – grundsätzlich mit einer Ver-

teilungsfunktion berechnet werden. Allein für die Energie der rotatorischen Freiheitsgrade ist gemäß dem Stand der Technik ein weiterer Verteilungsfunktionssatz notwendig, allerdings geschieht die Kopplung beider Verteilungsfunktionen problemlos. Für die variable Prandtlzahl, welche durch die Verwendung des BGK-Kollisionsoperators andernfalls auf  $Pr = 1$  limitiert wäre, wurde ein Quasi-Equilibriumsansatz adaptiert.

Die im Strömungsschritt notwendige Interpolation der Partikelverteilungsfunktionen wird durch einen zellbasierten Ansatz realisiert, wobei Gauß-Lobatto-Tschebyscheff-Stützstellen zum Einsatz kamen. Während viele bisherige Ansätze für kompressible Strömungen auf zwei Dimensionen beschränkt blieben, konnte die SLLBM für kompressible Strömungen auf ökonomische Weise auch in drei Dimensionen mit einem Geschwindigkeitssatz mit nur 45 Geschwindigkeitsvektoren realisiert werden. Bisherige Ansätze kompressibler LBM scheiterten hingegen oft daran, dass die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten bei dreidimensionalen Simulation extrem anstiegen.

Aufgrund der herausragenden Bedeutung der numerischen Quadratur für Methoden auf Basis der Boltzmann-Gleichung wie der LBM, aber auch der DVM, wurde diesem Thema ein eigenständiges Kapitel 4 gewidmet. Hier wurden die verschiedenen Möglichkeiten der Quadratur dargestellt und die Methoden zur Herleitung multivariater Quadraturregeln hoher Ordnung veranschaulicht. Bemerkenswerterweise fanden Kubaturregeln bei Off-Lattice-Boltzmann-Methoden bislang wenig Beachtung. Durch sie konnten jedoch neue Geschwindigkeitssätze für die kompressible SLLBM in zwei und drei Dimensionen abgeleitet werden und anhand der Symmetriebedingungen auf ihre Tauglichkeit für LBM-Simulationen überprüft werden.

Im Ergebniskapitel 5 wurde demonstriert, dass die SLLBM für kompressible Strömungen zahlreiche Vorteile aufweist. Insbesondere im Vergleich zu On-Lattice-Boltzmann-Verfahren konnte die Stabilität durch die flexible Zeitschrittweite verbessert werden, da die Zeitschrittweite der SLLBM dem Problem angepasst werden kann. Außerdem ist die Semi-Lagrangesche Zeitintegration nicht durch eine CFL-Bedingung eingeschränkt, wie es sowohl bei vielen expliziten Navier-Stokes-Lösern als auch Off-Lattice-Boltzmann-Verfahren der Fall ist.

Anhand von Stoßrohr- und 2D-Riemann-Simulationen wurde demonstriert, dass die Methode auch mit Diskontinuitäten operieren kann. Wie am Beispiel einer Stoß-Wirbel-Interaktion oder dem NACA-0012-Tragflächenprofil gezeigt, beherrscht die SLLBM auch verzerrte und körperangepasste Gitter, was bei kompressiblen On-Lattice-Boltzmann-Verfahren zur Zeit ebenso nicht per se möglich ist. Dadurch, dass die Methode nicht durch eine CFL-Bedingung beschränkt ist, erlaubt sie auch bei feinen Gittern akzeptable Zeitschrittweiten, die sich – anders als bei den Finite-Differenzen- oder Finite-Volumen-LBM – nicht zwangsweise an den kleinsten Zellweiten orientieren. Die Zeitintegration der SLLBM wird, wie bei der Standard-LBM, entlang der Charakteristiken durchgeführt. Dadurch gibt es in der SLLBM keinen dedizierten Zeitintegrationsoperator, was den Rechenaufwand gegenüber LBM mit Eulerschen Zeitintegrationsverfahren zusätzlich verringert.

Die Entkopplung von zeitlicher und räumlicher Diskretisierung ermöglichte auch, dass die diskreten Geschwindigkeiten erheblich gegenüber On-Lattice-Boltzmann-Verfahren reduziert werden konnten. Eine Reduktion der Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten ist attraktiv, da der Rechenaufwand linear mit der Anzahl diskreter Geschwindigkeiten skaliert. Während bereits die Anwendung der Produktregel auf die eindimensionale Gauß-Hermite-Quadratur deutlich schlankere Geschwindigkeitsätze hervorbringt als Quadraturen mit äquidistanten Stützstellen, so ermöglichen Kubaturregeln, dass die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten für mehrdimensionale Geschwindigkeitssätze nochmals erheblich reduziert werden kann. Dies betrifft sowohl schwach kompressible Strömungen, bei denen 13 diskrete Geschwindigkeiten in drei Dimensionen bereits ausreichen können, als auch kompressible Strömungen mit hohen Machzahlen. Trotz der drastisch reduzierten Rechenzeiten des D3Q45-Geschwindigkeitssatzes mit Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$ , konnten bei der Simulation des dreidimensionalen kompressiblen Taylor-Green-Wirbels gute Ergebnisse erlangt werden. Dieser Testfall wurde erst kürzlich in zwei Arbeiten untersucht [142, 161]. Der kompressible Taylor-Green-Wirbel eignet sich hervorragend zur Untersuchung von kompressiblen Methoden, da sowohl die auftretenden Stöße als auch die Wirbel im Verlauf der Simulation genau wiedergegeben werden müssen. Obwohl keine weiteren Filter- oder Stabilisierungstechniken eingesetzt wurden, reproduzierte die SLLBM akkurat den Verlauf der kinetischen Energie im Vergleich zur Literatur für beide Reynoldszahlen  $Re = 400$  und  $Re = 1600$  bei Machzahlen bis  $Ma = 2.0$ .

Anhand dieses Testfalls wurde auch deutlich, dass die Zeitschrittweiten der SLLBM im Vergleich zur Literatur mindestens eine Größenordnung größer sind. Dies lässt sich zum einen dadurch erklären, dass die LBM für kompressible Strömungen grundsätzlich recht große Zeitschrittweiten aufweisen. Zum anderen können bei der SLLBM Informationen während des Strömungsschritts auch über mehrere Zellen hinweg ausgetauscht werden, was bei Eulerschen Zeitintegrationsverfahren nicht üblich ist. Die abschließenden Simulationen umfassten eine transsonische und supersonische Kugelanstömung sowie eine supersonische Kanalströmung. Bei der Kugelumströmung war die Übereinstimmung des Stoßabstandes und des Druckverlaufs entlang der Kugeloberfläche sehr gut. Mit der supersonischen Kanalströmung wurde abschließend ein weiterer komplexer Testfall mit der SLLBM gerechnet. Die Van-Driest-transformierte Geschwindigkeit sowie die Viskositäts- und Dichteprofile entsprachen hier weitgehend den Werten der Literatur.

## 6.2 Diskussion und Ausblick

Die in dieser Arbeit entwickelte kompressible SLLBM ist eine geradlinige Weiterentwicklung der SLLBM für schwach kompressible Strömungen [114]. Die SLLBM wurde unter anderem für LBM-Simulationen mit unstrukturierten Gittern entwickelt und entstand unter dem Eindruck hoher Rechenzeiten einer damals ebenfalls untersuch-

ten Spectral-Element-Discontinuous-Galerkin-LBM (SEDG) [113, 116].

Im Vergleich zu diesem Verfahren ist die SLLBM sowohl in der schwach kompressiblen als auch kompressiblen Variante in der Lage – trotz des expliziten Zeitintegrationschemas – größere Zeitschrittweiten zu realisieren als die SEDG-LBM. Gleichzeitig wurde der rechnerische Aufwand drastisch reduziert. Diese Verbesserung wird durch die Entkopplung der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung der SLLBM begünstigt, denn aufgrund der Lagrangeschen Zeitintegration ist der Strömungsschritt frei von einer CFL-Bedingung. Allerdings unterliegt der BGK-Kollisionsoperator weiterhin Beschränkungen hinsichtlich der Relaxationszeit, welche proportional zur Zeitschrittweite ist. Dem gegenüber gestellt ist jedoch die Nichterhaltung der konservativen Größen ein wesentlicher und oft kritisiertes Nachteil der interpolationsbasierten LBM gegenüber der Standard-LBM [126], der SEDG-LBM oder der Finite-Volumen-LBM. Die Verwendung einer hohen Interpolationsordnung reduziert dieses Problem, ohne es jedoch endgültig zu lösen. Die Erforschung einer konservativen SLLBM erscheint daher sinnvoll.

Hinsichtlich der Komplexität des Advektionsoperators ordnet sich die SLLBM zwischen der Standard-LBM mit exaktem Strömungsschritt und den Methoden mit Eulerschen Zeitintegrationsverfahren, wie der Finite-Volumen- und Finite-Elemente-LBM, ein. Für jede diskrete Geschwindigkeit reduziert sich der Advektionsschritt im Vergleich zu Runge-Kutta-Verfahren auf eine einzige dünnbesetzte Matrix-Vektor-Multiplikation in jedem Zeitschritt. Allerdings bleiben die Advektionsmatrizen ein Engpass in Simulationen mit Off-Lattice-Boltzmann-Methoden, da die Matrizen in jedem Zeitschritt neu aus dem Arbeitsspeicher geladen werden müssen.

Ein Ansatz zur Lösung dieser Einschränkung sind matrixfreie Ansätze, deren Entwicklung allerdings noch nicht abgeschlossen ist [120]. Matrixfreie Methoden berechnen die Ansatzfunktionen jeder Zelle in jedem Zeitschritt erneut und versprechen hierdurch die Leistungskapazitäten moderner CPU auszunutzen. Dieser Ansatz ist vor allem dann effizient, wenn die zu interpolierenden Punkte symmetrisch in der Zelle verteilt sind, sodass sich die mehrdimensionalen Ansatzfunktionen einfach aus den eindimensionalen Ansatzfunktionen ermitteln lassen. Dies ist bei der SLLBM nicht der Fall, da die Departure-Points in jeder Zelle beliebig verteilt sein können und nicht symmetrisch im Bezug auf den Zellmittelpunkt vorliegen.

Ein matrixfreier Ansatz ist ebenso bei Implementierungen der Particles-on-Demand-Methode (PonD) [53] notwendig. Dieser Ansatz rechnet in einem dynamischen Referenzrahmen, der sich immer an der lokalen Strömungsgeschwindigkeit orientiert, hierdurch aber wesentlich größere Machzahlen erreichen kann [53]. Durch den variablen Referenzrahmen sind die Departure-Points allerdings in jedem Zeitschritt neu zu ermitteln.

Ein linearen Zusammenhang zur Rechenzeit ergibt sich für die SLLBM bei der Anzahl der Abszissen der Geschwindigkeitssätze. Zu Beginn der Arbeit war bereits bekannt, dass eine relevante kompressible LBM nur wenig diskrete Geschwindigkeiten

aufweisen darf, da bisher viele LBM für kompressible Strömungen aufgrund extrem großer Geschwindigkeitssätzen nicht weiterverfolgt wurden. Als Beispiel sei hier der Geschwindigkeitssatz von Frapolli et al. mit 343 diskreten Geschwindigkeiten genannt [67], was sicherlich als obere Schranke für kompressible Strömungen angesehen werden kann. Durch den Blick auf benachbarte Forschungsfelder – in diesem Fall auf jenes der multivariaten Quadraturen – konnte hingegen ein Geschwindigkeitssatz gefunden werden, der die Anzahl der diskreten Geschwindigkeiten drastisch reduziert: Der D3Q45-Geschwindigkeitssatz mit 45 diskreten Geschwindigkeiten und Quadraturgrad  $\mathfrak{N} = 9$  wurde bisher nicht in Off-Lattice-Boltzmann-Simulationen eingesetzt. Dennoch ist nicht auszuschließen, dass in Zukunft noch effizientere Geschwindigkeitssätze gefunden werden können. Wie im Kapitel 4 erläutert, liegt das theoretische Minimum bei 35 diskreten Geschwindigkeiten. Aufgrund der freien Orientierung im Raum werden sich zukünftige Geschwindigkeitssätze möglicherweise nach und nach diesem Wert annähern. Jede Verkleinerung der Geschwindigkeitssätze wirkt sich sofort auf die numerische Effizienz des Verfahrens aus.

Die Simulationen dieses Kapitels zeigen, dass die kompressible SLLBM sowohl zwei- als auch dreidimensionale viskose Überschallströmungen mindestens bis zur Machzahl  $Ma \approx 2.0$  berechnen kann. Neben der Interpolation nutzt die vorgeschlagene Methode aktuell keine weiteren Techniken zur Stabilisierung, wie künstliche Viskosität, künstliche Diffusivität oder Filtern und unterscheidet sich damit grundlegend von sämtlichen Lösern der Navier-Stokes-Gleichungen. Es ist weitgehend bekannt, dass der verwendete BGK-Kollisionsoperator für schwach kompressible Strömungen mit hohen Reynoldszahlen nur unzureichende Stabilitätseigenschaften aufweist [154]. Daher ist anzunehmen, dass fortentwickelte Kollisionsschemata in Kombination mit der kompressiblen SLLBM die Stabilität unter aufgelöster Strömungen weiter verbessern werden. Aufgrund der Größe der Geschwindigkeitssätze ist jedoch nicht davon auszugehen, dass ein Multi-Relaxation-Time-Kollisionsoperator in einer klassischen Matrix-Vektor-Multiplikation realisiert werden wird, wie in Abschnitt 2.7 für schwach kompressible LBM diskutiert. Vielmehr werden Ansätze einer Regularisierung mit hoher Ordnung hier zu einer Verbesserung führen, wie von Coreixas et al. oder Mattila et al. [144] vorgeschlagen. Die Überprüfung dieser Ansätze in der SLLBM obliegt zukünftigen Arbeiten. Zu diesem Aspekt sei abschließend die Arbeit von Zipunova et al. erwähnt, die eine Regularisierung für die verwandte PonD-Methode einführte [234] und Ausgangspunkt für weitere Überlegungen sein kann.

Gegenüber den im Verlauf der vorliegenden Arbeit entstanden SLLBM-Arbeiten anderer Autoren [53, 176] ist festzuhalten, dass ausschließlich die hier präsentierte kompressible SLLBM ausreichend entwickelt ist, um komplexe dreidimensionale Strömungen zu simulieren. Außerdem können Simulationen hoher räumlicher Ordnung nur dann stabil durchgeführt werden, wenn die Stützstellen in Zellen randbetont angeordnet werden, was bei der vorgeschlagenen SLLBM der Fall ist. Im Vergleich zu der vielbeachteten PonD-Methode von Dorschner et al. [53] verzichtet die kompressible SLLBM auf den ständigen Wechsel des Referenzrahmens und kann dennoch super-

sonische Strömungen berechnen. Daher sind beide Methode je nach Anwendungsfall eine ideale Ergänzung zueinander.

Die Tatsache, dass kürzlich erschienene Arbeiten mit der Finite-Volumen-LBM DUGKS ebenfalls kompressible Simulationen mit Gleichgewichtsfunktionen auf Basis der Hermite-Expansion in Kombination mit einer Geschwindigkeitsdiskretisierung der Ordnung  $\mathfrak{N} = 9$  durchführten [167, 217], zeigt die zunehmende Beachtung dieses Ansatzes – trotz der Simplität. In Bezug auf die räumliche Ordnung des Verfahrens und die Komplexität des Advektionsschritts ist die SLLBM allerdings überlegen, außerdem reduziert der D3Q45-Geschwindigkeitssatz den Rechenaufwand gegenüber dem dort verwendeten D3Q77 deutlich.

Auch Randbedingungen konnten mit der vorgeschlagenen SLLBM für kompressible Strömungen erfolgreich an einem NACA-0012-Tragflächenprofil, an einer Kugelumströmung sowie einer supersonischen Kanalströmung angewandt werden. Die Verwendung verzerrter, körperangepasster Gitter ist ein wesentlicher Pluspunkt der Methode gegenüber LBM mit kartesischen Gittern. Entwicklungsbedarf besteht jedoch bei nicht-adiabaten SLLBM-Bounce-Back-Randbedingungen, bei denen die Temperatur oder der Wärmefluss an den Rändern vorgegeben werden. Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz für Temperaturrandbedingungen ist zwar ausreichend, um akzeptable Ergebnisse in der supersonischen Kanalströmung zu erzielen. Für die Verwendung größerer Zeitschrittweiten bedarf es hier jedoch Verbesserungen, denen sich zukünftige Arbeiten widmen können.

Eine weitere Möglichkeit für zukünftige Arbeiten ist die Vergrößerung der Knudsenzahl. Wie in Kapitel 2 erläutert, fußt die LBM im Kern auf der Boltzmann-Gleichung. Ein wesentliches Alleinstellungsmerkmal von Methoden auf Basis der Boltzmann-Gleichung gegenüber Methoden, welche die Navier-Stokes-Gleichungen diskretisieren, ist die Möglichkeit zur Berechnung von Strömungen im Nichtgleichgewicht oder mit Bereichen unterschiedlicher Knudsenzahlen. Kapitel 4 gab Aufschluss darüber, dass eine Erweiterung der SLLBM für verdünnte Strömungen durch eine Anpassung der Geschwindigkeitsdiskretisierung möglich ist. Eine interessante Weiterentwicklung der SLLBM sind daher auch Simulationen mit adaptiver Verfeinerung des Geschwindigkeitsraums, wie sie von Kallikounis et al. kürzlich vorgeschlagen wurden [107]. In deren Arbeit kommt in Gebieten mit niedriger Knudsen- oder Machzahl der D2Q9-Geschwindigkeitssatz zum Tragen, wohingegen Gebiete der Simulation mit höheren Knudsen- oder Machzahlen mit dem D2Q25-Geschwindigkeitssatz simuliert werden. Die Transformation zwischen den Geschwindigkeitssätzen erfolgt dabei lokal mittels Transformationsmatrizen, wobei fehlende Momente mithilfe der Gleichgewichtsverteilung ermittelt werden.

Die Arbeit zeigt letztlich auch Wege, um die SLLBM mittels einer geeigneten Quadratur oder Kubatur auf verdünnte Gase zu erweitern. Somit ist die kompressible SLLBM ein mögliches Modell eines effizienten Lösers, welcher sich für eine große Bandbreite an Knudsenzahlen eignet.

## Fazit

Das Ziel, einen kompressiblen Löser auf Basis der Semi-Lagrangeschen LBM zu entwickeln, wurde in dieser Arbeit erreicht. Als Alleinstellungsmerkmale gegenüber On-Lattice-Boltzmann-Methoden sind die Stabilität, die einstellbare Zeitschrittweite, die Möglichkeit zur Nutzung verzerrter und unstrukturierter Gitter, sowie zuletzt die hohe räumliche Ordnung zu nennen. Im Vergleich zu bisherigen Off-Lattice-Boltzmann-Methoden, wie Finite-Differenzen-LBM oder Finite-Volumen-LBM, zeichnet sich die kompressible SLLBM durch einen kompakten Algorithmus, mit einer einzigen Auswertung des Advektionsoperators pro Zeitschritt, aus. Außerdem können im Vergleich zu diesen Verfahren größere Zeitschrittweiten realisiert werden. Durch die Ableitung geeigneter Geschwindigkeitssätze aus Kubaturregeln konnte die Effizienz des Verfahrens auch in drei Dimensionen gewährleistet werden. Die erfolgreichen Simulationen dreidimensionaler, kompressibler Probleme unterstreichen die Relevanz der Ergebnisse für kommende Forschungsvorhaben. Zusammengefasst ist die kompressible SLLBM somit ein wettbewerbsfähiges Schema zur Simulation reibungsbehafteter, supersonischer Strömungen.





# A Chapman-Enskog-Entwicklung

---

In diesem Anhang wird gezeigt, dass die kompressiblen SLLBM-Gleichungen mittels Chapman-Enskog-Analyse in die kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen überführt werden können. Die gesamte folgende Herleitung stammt dabei aus Wilde et al. [221]. Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, werden die Verteilungsfunktionen durch einen Parameter  $\epsilon$  entwickelt

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots + \epsilon^k f^{(k)}. \quad (\text{A.1})$$

Wenn die Navier-Stokes-Gleichungen gewonnen werden sollen, dann gilt  $k = 2$ . Ausgangspunkt der Chapman-Enskog-Entwicklung ist eine modifizierte Darstellungsform von Gl. (3.10)

$$h_i(\mathbf{x} + \delta_t \boldsymbol{\xi}_i, t + \delta_t) = h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (h_i(\mathbf{x}, t) - h_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)), \quad (\text{A.2})$$

sodass die Verteilungsfunktion des nächsten Zeitschritts, analog zu Gl. (2.51), auf der linken Seite der Gleichung steht. Die zugehörigen Momentenbeziehungen der konservativen Größen aus Gleichungen (2.10) sowie (3.12) lauten

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\text{eq}}, \quad (\text{A.3})$$

$$\rho u_\alpha = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} \xi_{i\alpha} f_i^{\text{eq}}, \quad (\text{A.4})$$

$$2\rho C_v T = \sum_{i=0}^{Q-1} (|\boldsymbol{\xi}_i|^2 f_i + g_i) = \sum_{i=0}^{Q-1} (|\boldsymbol{\xi}_i|^2 f_i^{\text{eq}} + g_i^{\text{eq}}). \quad (\text{A.5})$$

Zunächst wird eine Mehrskalentwicklung auf die zeitlichen Ableitungen angewandt

$$\partial_\alpha = \epsilon \partial_\alpha, \quad (\text{A.6})$$

$$\partial_t = \epsilon \delta_t^{(1)} + \epsilon^2 \delta_t^{(2)}, \quad (\text{A.7})$$

wobei  $\epsilon$  als Knudsenzahl interpretiert werden kann [27]. Die diskreten Verteilungsfunktionen  $h_i$ , stellvertretend für  $f_i$  sowie  $g_i$ , werden ebenso expandiert

$$h_i = h_i^{(0)} + \epsilon h_i^{(1)} + \epsilon^2 h_i^{(2)}. \quad (\text{A.8})$$

Als nächstes wird Gl. (A.2) mit einer Taylorreihe zweiten Grades entwickelt und die soeben expandierten Verteilungsfunktionen (A.8) eingesetzt

$$(\epsilon D_i + \frac{\epsilon^2}{2} D_i D_i) h_i = -\frac{1}{\tau} (h_i - h_i^{\text{eq}}). \quad (\text{A.9})$$

Dabei steht  $D_i$  für die materielle Ableitung [122]

$$\epsilon D_i = \epsilon D_i^{(1)} + \epsilon^2 D_i^{(2)} = \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon \xi_{i\alpha} \partial_\alpha + \epsilon^2 \partial_t^{(2)}, \quad (\text{A.10})$$

Im nächsten Schritt wird Gl. (A.8) auf (A.9) angewendet und es werden ausschließlich die Terme gleicher Expansionsordnung betrachtet. Die Terme der Expansionsordnung  $\epsilon^0$  lauten somit

$$0 = -\frac{1}{\tau} (h^{(0)} - h^{\text{eq}}), \quad (\text{A.11})$$

wobei die sich hierdurch ergebene Beziehung

$$h_i^{(0)} = h_i^{\text{eq}}, \quad (\text{A.12})$$

zeigt, dass die nullte Expansionsordnung der Strömung im Gleichgewicht entspricht.

Nun können als nächstes die Momentenbeziehungen von Gleichungen (A.3) bis (A.5) auf Gl. (A.11) angewendet werden, allerdings muss anstelle von  $h_i$  zwischen  $f_i$  und  $g_i$  unterschieden werden, d.h.,

$$\sum_i f_i^{(0)} \{1, \xi_{i\alpha}\} = \sum_i f_i^{\text{eq}} \{1, \xi_{i\alpha}\} \quad (\text{A.13})$$

sowie

$$\sum_i (f_i^{(0)} |\boldsymbol{\xi}_i|^2 + g_i^{(0)}) = \sum_i (f_i^{\text{eq}} |\boldsymbol{\xi}_i|^2 + g_i^{\text{eq}}), \quad (\text{A.14})$$

womit sich die Massen-, Impuls- und Energieerhaltung ergibt und gleichzeitig

$$\sum_i f_i^{(1)} \{1, \xi_{i\alpha}\} = \sum_i f_i^{(2)} \{1, \xi_{i\alpha}\} = 0, \quad (\text{A.15})$$

$$\sum_i (f_i^{(1)} |\boldsymbol{\xi}_i|^2 + g_i^{(1)}) = \sum_i (f_i^{(2)} |\boldsymbol{\xi}_i|^2 + g_i^{(2)}) = 0, \quad (\text{A.16})$$

gefolgert werden kann.

Im nächsten Schritt werden die Terme der Ordnung  $\epsilon^1$  erfasst

$$D_i^{(1)} h_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} h_i^{(1)}. \quad (\text{A.17})$$

Nun werden wieder die Momentenbeziehungen der Gleichungen (A.3) bis (A.5) angewendet, womit sich für die nullte Ordnung

$$D_i^{(1)} \rho = \partial_t^{(1)} \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (\text{A.18})$$

ergibt.

Bei den Momenten erster Ordnung werden dann die Gleichungen (2.34c)  $\Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \rho(u_\alpha u_\beta + T_0(\theta - 1)\delta_{\alpha\beta})$  sowie die Druckbeziehung  $P = \rho R(T - T_0)$  mit  $R := 1$  eingesetzt, womit sich

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} &= 0, \\ \partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha (P) \delta_{\alpha\beta} &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

ergibt. Für die totale Energie führt die Expansion für die Terme der Ordnung  $\epsilon^1$  zu

$$\partial_t^{(1)} (\rho E) + \partial_\alpha (u_\alpha \rho E) = -P \partial_\alpha u_\alpha \quad (\text{A.20})$$

bzw. in Abhängigkeit der Temperatur.

$$\partial_t^{(1)} T = -u_\alpha \partial_\alpha T - \frac{P}{\rho C_v} \partial u_\alpha \quad (\text{A.21})$$

Gleichungen (A.18) bis (A.21) sind die Eulergleichungen, was gem. der in Abschnitt 2.2 dargestellten Hierarchie der Chapman-Enskog-Analyse für die maximale Expansionsordnung  $k = 1$  so zu erwarten war. Folglich müssen für die Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen ebenso die Terme  $\epsilon^2$  zusammengetragen werden. Dies führt zu

$$D_i^{(2)} h_i^{(0)} + D_i^{(1)} h_i^{(1)} + \frac{1}{2} D_i^{(1)} D_i^{(1)} h_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} h_i^{(2)}. \quad (\text{A.22})$$

In diese Gleichung kann nun zur Vereinfachung Gl. (A.17) eingesetzt werden

$$D_i^{(2)} h_i^{(0)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) D_i^{(1)} h_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} h_i^{(2)}. \quad (\text{A.23})$$

Aufgrund verschwindender Terme in Gl. (A.23) erhält man für die Momente nullter Ordnung

$$\partial_t^{(2)} \rho = 0. \quad (\text{A.24})$$

Die Momente erster Ordnung, auf Gl. (A.23) angewendet, ergeben

$$\partial_t^{(2)}(\rho u_\alpha) = -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}. \quad (\text{A.25})$$

Ziel der folgenden Schritte ist es, die Nichtgleichgewichtsbeziehung  $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$  der vorherigen Gleichung gleichwertig durch Gleichgewichtsmomente zu ersetzen, was mit dem Moment zweiter Ordnung von Gl. (A.17) erreicht werden kann. Dies führt zu

$$\partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma \mathcal{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} = -\frac{1}{\tau} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)}. \quad (\text{A.26})$$

Dieser Ausdruck wird dann in Gl. (A.25) eingesetzt

$$\partial_t^{(2)}(\rho u_\alpha) = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \partial_\beta \left(\partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} + \partial_\gamma \mathcal{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{(0)}\right). \quad (\text{A.27})$$

Der nächste Schritt ist, die zeitlichen Ableitungen auf der rechten Seite der Gl. (A.27) gleichwertig zu ersetzen. Die gesuchten Gleichgewichtsmomente können durch die Gleichungen (2.34c) und (2.34d) explizit angegeben werden. Wendet man dann die Produktregel an und verwendet die Euler-Gleichungen für Masse (A.18), Impuls (A.19) und Temperatur (A.21), um die zeitlichen Ableitungen zu ersetzen, so erhält man

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = & -\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) - \frac{P}{C_v} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \\ & - \partial_\gamma(P u_\gamma) \delta_{\alpha\beta} - u_\alpha \partial_\beta P - u_\beta \partial_\alpha P \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

sowie

$$\begin{aligned} \partial_\gamma \mathcal{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{(0)} = & \partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) + P \partial_\beta u_\alpha + P \partial_\alpha u_\beta \\ & + \partial_\gamma(P u_\gamma) \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha \partial_\beta P + u_\beta \partial_\alpha P. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Mit diesen Ausdrücken lässt sich Gl. (A.27) zu

$$\partial_t^{(2)}(\rho u_\alpha) = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \partial_\beta \left[ P(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) - \frac{P}{C_v} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right], \quad (\text{A.30})$$

umformen. Man beachte, dass der kubische Geschwindigkeitsterm in Gl. (A.28) sich nur dann mit dem Term in Gl. (A.29) aufhebt, wenn das Gleichgewicht aus Gl. (3.9) mindestens bis zur dritten Ordnung expandiert wird.

Zuletzt wird die totale Energie ermittelt

$$\partial_t^{(2)}(\rho E) = -\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \partial_\beta q_\beta^{(1)}, \quad (\text{A.31})$$

wobei der Vektor

$$q_\beta^{(1)} = \sum_i \frac{1}{2} |\xi_i|^2 \xi_{i\beta} f_i^{(1)} \quad (\text{A.32})$$

eine kontrahierte Form des Tensors  $\mathcal{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{(1)}$  aus Gl. (2.34d) ist. Ähnlich wie im Fall von Gl. (A.25) kann dieser Vektor durch Gleichgewichtsmomente ausgedrückt werden

$$q_\beta^{(1)} = -\tau(\partial_t^{(0)} q_\beta^{(0)} + \partial_\gamma r_{\beta\gamma}^{(0)}) \quad (\text{A.33})$$

mit

$$r_{\beta\gamma}^{(0)} = \sum_i \frac{1}{2} |\xi_i|^2 \xi_{i\beta} \xi_{i\gamma} f_i^{(0)}. \quad (\text{A.34})$$

Ähnlich wie  $q_\beta$  ist der Tensor  $r_{\beta\gamma}$  die kontrahierte Variante von  $\mathcal{R}_{\alpha\beta\gamma\delta}$  aus Gl. (2.34e). Wiederum durch eine Reihe von Ersetzungen erhält man [42]

$$q_\beta^{(1)} = -\tau P \left\{ (1 + C_v) \partial_\beta T + \partial_\beta \left[ u_\gamma (\partial_\beta u_\gamma + \partial_\gamma u_\beta) - u_\gamma \frac{\partial_\delta u_\delta}{C_v} \delta_{\beta\gamma} \right] \right\}. \quad (\text{A.35})$$

Dieser Term ergänzt nun die Gleichung (A.31). Final werden nun alle Beiträge der Ordnungen  $\epsilon^0$ ,  $\epsilon^1$  sowie  $\epsilon^2$  summiert und es ergeben sich eine Formulierung analog zu den kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen (2.1) bis (2.3)

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (\text{A.36})$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + P \delta_{\alpha\beta}) = \partial_\beta (\sigma_{\alpha\beta}), \quad (\text{A.37})$$

$$\partial_t (\rho E) + \partial (\rho E u_\beta) = -\partial_\beta (\lambda \partial_\beta T) + \partial_\beta (u_\gamma \sigma_{\beta\gamma}), \quad (\text{A.38})$$

mit der dynamischen Viskosität  $\mu = \tau P$ , der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda = \tau P (C_v + 1) = \tau P C_p$ . Der Spannungstensor kann somit wie folgt identifiziert werden

$$\sigma_{\alpha\beta} = \mu \left( [\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha] - P \delta_{\alpha\beta} \right) - \frac{\mu}{C_v} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.39})$$

Da die dynamische Viskosität vom lokalen Druck  $P$  abhängt, muss der Relaxationsparameter druckabhängig sein, d.h.  $\tau = \mu / (P \delta_t) + 0.5$ . Aus Gl. (A.39) lässt sich die Volumenviskosität in Bezug auf die Notation in Gl. (A.37) als  $\mu_b = \mu / C_v$  identifizieren.

Man beachte, dass die vorgestellte Herleitung die Wärmeleitfähigkeit mit der dynamischen Viskosität verknüpft, da die Chapman-Enskog-Entwicklung von Gl. (A.2) den Quasi-Equilibriums-Ansatz nicht berücksichtigt. Für die entsprechende Erweiterung der Chapman-Enskog-Analyse sei auf [67] verwiesen.



# B Off-Lattice Geschwindigkeitssätze

---

Nachfolgend sind die Geschwindigkeitssätze D3Q13 (Tab. B.1) und D3Q21 (Tab. B.2) mit  $\mathfrak{N} = 5$ , D3Q27 (Tab. B.3) mit  $\mathfrak{N} = 7$  und D2Q19 (Tab. B.4) sowie D3Q45 (Tab. B.5) mit  $\mathfrak{N} = 9$  gelistet.

**Tabelle B.1:** Abszissen  $\xi_i$  und Gewichte  $w_i$  des D3Q13-Geschwindigkeitssatzes.

$i$	$w_i$	$\xi_i$
0	$2/5$	$(0, 0, 0)$
$1, \dots, 4$	$1/20$	$(0, \pm r, \pm s)$
$5, \dots, 8$	$1/20$	$(\pm s, 0, \pm r)$
$9, \dots, 12$	$1/20$	$(\pm r, \pm s, 0)$
$c_s = 1$	$r^2 = (5 + \sqrt{5})/2$	$s^2 = (5 - \sqrt{5})/2$

**Tabelle B.2:** Abszissen  $\xi_i$  und Gewichte  $w_i$  des D3Q21-Geschwindigkeitssatzes.

$i$	$w_i$	$\xi_i$
0	2/5	(0, 0, 0)
1, ..., 8	3/100	( $\pm 1, \pm 1, \pm 1$ )
9, ..., 12	3/100	(0, $\pm\phi, \pm 1/\phi$ )
13, ..., 16	3/100	( $\pm 1/\phi, 0, \pm\phi$ )
17, ..., 20	3/100	( $\pm\phi, \pm 1/\phi, 0$ )

$c_s = \sqrt{3/5}$     $\phi = (1 + \sqrt{5})/2$ .

**Tabelle B.3:** Abszissen  $\xi_i$  und Gewichte  $w_i$  des D3V27-Geschwindigkeitssatzes.

$i$	$w$	$\xi_{ix}$	$\xi_{iy}$	$\xi_{iz}$
0	$w_0$	0.0	0.0	0.0
1, ..., 8	$w_1$	$\pm c_1$	$\pm c_1$	$\pm c_1$
9, ..., 14	$w_2$	$\pm 2.358709038202103$	0.0	0.0 (cyc)
15, ..., 26	$w_3$	$\pm 3.142130383387586$	$\pm 3.142130383387586$	0.0 (cyc)

$c_s = 1,$     $c_1 = 1.1198362860638005$   
 $w_0 = 0.31247897198654906$     $w_1 = 0.06338446047675325$   
 $w_2 = 0.029035130153906134$     $w_3 = 0.00051954693966568$

**Tabelle B.4:** Abszissen  $\xi_i$  und Gewichte  $w_i$  des D2Q19-Geschwindigkeitssatzes.

$i$	$w$	$\xi_{ix}$	$\xi_{iy}$
0	0.3168437267921905	0.0	0.0
1, 2	0.10558878375062891	$\pm 1.4869982213169028$	0.0
3, 4, 5, 6	0.1024247123210936	$\pm 0.775196278121181$	$\pm 1.367469636752619$
7, 8, 9, 10	0.00953510698543825	$\pm 2.5175897644357486$	$\pm 1.105629214668943$
11, 12	0.006865104210104631	0.0	$\pm 2.9213306655318734$
13, 14, 15, 16	0.002405335328939458	$\pm 1.8663975507141328$	$\pm 2.6987507639352253$
17, 18	0.0003939393722285871	$\pm 3.8358342053914734$	0.0

$c_s = 1$



Tabelle B.5: Abszissen  $\xi_i$  und Gewichte  $w_i$  des D3Q45-Geschwindigkeitssatzes.

$w$	$\xi_{ix}$	$\xi_{iy}$	$\xi_{iz}$
$w_0$	0.0	0.0	0.0
$w_1$	0.06386083877343968	-1.2239121278243665	-1.2239121278243665
$w_1$	-0.06386083877343968	1.2239121278243665	1.2239121278243665
$w_1$	1.2239121278243665	-0.06386083877343968	1.2239121278243665
$w_1$	-1.2239121278243665	0.06386083877343968	-1.2239121278243665
$w_1$	1.2239121278243665	1.2239121278243665	-0.06386083877343968
$w_1$	-1.2239121278243665	-1.2239121278243665	0.06386083877343968
$w_1$	1.5766994272507744	-0.5069610024977665	-0.5069610024977665
$w_1$	-1.5766994272507744	0.5069610024977665	0.5069610024977665
$w_1$	0.5069610024977665	0.5069610024977665	-1.5766994272507744
$w_1$	-0.5069610024977665	-0.5069610024977665	1.5766994272507744
$w_1$	-0.5069610024977665	1.5766994272507744	-0.5069610024977665
$w_1$	0.5069610024977665	-1.5766994272507744	0.5069610024977665
$w_2$	2.403092127540177	0.8892242114059369	-1.5602655313772367
$w_2$	-2.403092127540177	-0.8892242114059369	1.5602655313772367
$w_2$	-2.403092127540177	1.5602655313772367	-0.8892242114059369
$w_2$	2.403092127540177	-1.5602655313772367	0.8892242114059369
$w_2$	-0.8892242114059369	-2.403092127540177	1.5602655313772367
$w_2$	0.8892242114059369	2.403092127540177	-1.5602655313772367
$w_2$	-0.8892242114059369	1.5602655313772367	-2.403092127540177
$w_2$	0.8892242114059369	-1.5602655313772367	2.403092127540177
$w_2$	-1.5602655313772367	0.8892242114059369	2.403092127540177
$w_2$	-1.5602655313772367	2.403092127540177	0.8892242114059369
$w_2$	1.5602655313772367	-0.8892242114059369	-2.403092127540177
$w_2$	1.5602655313772367	-2.403092127540177	-0.8892242114059369
$w_2$	0.4744978678080795	0.4744978678080795	2.9239876105912574
$w_2$	0.4744978678080795	2.9239876105912574	0.4744978678080795
$w_2$	-0.4744978678080795	-0.4744978678080795	-2.9239876105912574
$w_2$	-0.4744978678080795	-2.9239876105912574	-0.4744978678080795
$w_2$	2.9239876105912574	0.4744978678080795	0.4744978678080795
$w_2$	-2.9239876105912574	-0.4744978678080795	-0.4744978678080795
$w_2$	1.7320508075688787	1.7320508075688787	1.7320508075688787
$w_2$	-1.7320508075688787	-1.7320508075688787	-1.7320508075688787
$w_3$	-2.7367507163016924	0.14279717659756475	-2.7367507163016924
$w_3$	2.7367507163016924	2.7367507163016924	-0.14279717659756475
$w_3$	2.7367507163016924	-0.14279717659756475	2.7367507163016924
$w_3$	-2.7367507163016924	-2.7367507163016924	0.14279717659756475
$w_3$	0.14279717659756475	-2.7367507163016924	-2.7367507163016924
$w_3$	-0.14279717659756475	2.7367507163016924	2.7367507163016924
$w_3$	-3.5256070994177073	1.1335992635264445	1.1335992635264445
$w_3$	3.5256070994177073	-1.1335992635264445	-1.1335992635264445
$w_3$	1.1335992635264445	-3.5256070994177073	1.1335992635264445
$w_3$	-1.1335992635264445	3.5256070994177073	-1.1335992635264445
$w_3$	1.1335992635264445	1.1335992635264445	-3.5256070994177073
$w_3$	-1.1335992635264445	-1.1335992635264445	3.5256070994177073
$c_s = 1$	$w_0 = 0.20740740740740618$	$w_1 = 0.05787037037037047$	$w_2 = 0.00462962962962958$
	$w_3 = w_2/10$		



# Literaturverzeichnis

---

- [1] ADAMS, N. A., AND SHARIFF, K. A High-Resolution Hybrid Compact-ENO Scheme for Shock-Turbulence Interaction Problems. *J. Comput. Phys.* 127, 1 (1996), 27–51.
- [2] ALEXANDER, F. J., CHEN, H., CHEN, S., AND DOOLEN, G. D. Lattice Boltzmann model for compressible fluids. *Phys. Rev. A* 46, 4 (1992), 1967–1970.
- [3] AMBROSIO, A., AND WORTMAN, A. Stagnation-Point Shock-Detachment Distance for Flow Around Spheres and Cylinders in Air. *Journal of the Aerospace Sciences* 29, 7 (1962), 875–875.
- [4] ANGELINO, M., FERNÁNDEZ-YÁÑEZ, P., XIA, H., AND PAGE, G. J. Large-eddy simulation with modeled wall stress for complex aerodynamics and stall prediction. *AIAA J.* 59, 4 (2021), 1225–1237.
- [5] ANSUMALI, S., ARCIDIACONO, S., CHIKATAMARLA, S. S., PRASIANAKIS, N. I., GORBAN, A. N., AND KARLIN, I. V. Quasi-equilibrium lattice Boltzmann method. *Eur. Phys. J. B* 56, 2 (2007), 135–139.
- [6] ANSUMALI, S., KARLIN, I. V., AND ÖTTINGER, H. C. Minimal entropic kinetic models for hydrodynamics. *Europhys. Lett.* 63, 6 (2003), 798–804.
- [7] ARISTOV, V. V., ILYIN, O. V., AND ROGOZIN, O. A. Kinetic multiscale scheme based on the discrete-velocity and lattice-Boltzmann methods. *J. Comput. Sci.* 40 (2020), 101064.
- [8] ARNDT, D., BANGERTH, W., FEDER, M., FEHLING, M., GASSMÖLLER, R., HEISTER, T., HELTAI, L., KRONBICHLER, M., MAIER, M., MUNCH, P., PELTERET, J.-P., STICKO, S., TURCK SIN, B., AND WELLS, D. The deal.II library, version 9.4. *J. Numer. Math.* 30, 3 (2022), 231–246.

- [9] ATIF, M., KOLLURU, P. K., THANTANAPALLY, C., AND ANSUMALI, S. Essentially Entropic Lattice Boltzmann Model. *Phys. Rev. Lett.* 119, 24 (2017), 1–5.
- [10] ATIF, M., NAMBURI, M., AND ANSUMALI, S. Higher-order lattice Boltzmann model for thermohydrodynamics. *Phys. Rev. E* 98, 5 (2018), 053311.
- [11] ATKINSON, K. E. *An introduction to numerical analysis*. John Wiley and Sons, 1978.
- [12] BASSI, F., AND REBAY, S. A High-Order Accurate Discontinuous Finite Element Method for the Numerical Solution of the Compressible Navier–Stokes Equations. *J. Comput. Phys.* 131, 2 (1997), 267–279.
- [13] BEDRUNKA, M. C., WILDE, D., KLIEMANK, M., REITH, D., FOYSI, H., AND KRÄMER, A. Lettuce: PyTorch-based Lattice Boltzmann Framework, 2021.
- [14] BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P., AND KROOK, M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.* 94, 3 (1954), 511–525.
- [15] BIRD, G. A. Monte Carlo Simulation of Gas Flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 114, 8 (1978), 11–31.
- [16] BO, Y., WANG, P., GUO, Z., AND WANG, L. P. DUGKS simulations of three-dimensional Taylor–Green vortex flow and turbulent channel flow. *Comput. Fluids* 155 (2017), 9–21.
- [17] BOBYLEV, A. V. On the Chapman–Enskog and Grad methods of the solution of Boltzmann equation. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 262 (1982), 71–75.
- [18] BÖSCH, F., CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Entropic multirelaxation lattice Boltzmann models for turbulent flows. *Phys. Rev. E* 92, 4 (2015), 1–15.
- [19] BÖSCH, F., AND KARLIN, I. V. Exact lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. Lett.* 111, 9 (2013).
- [20] BOUZIDI, M., FIRDAOUSS, M., AND LALLEMAND, P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Phys. Fluids* 13, 11 (2001), 3452–3459.
- [21] BRACHET, M. E., MEIRON, D. I., ORSZAG, S. A., NICKEL, B. G., MORF, R. H., AND FRISCH, U. Small-scale structure of the Taylor–Green vortex. *J. Fluid Mech.* 130, -1 (1983), 411.
- [22] BREHM, C., BARAD, M. F., HOUSMAN, J. A., AND KIRIS, C. C. A comparison of higher-order finite-difference shock capturing schemes. *Comput. Fluids* 122 (2015), 184–208.

- [23] CAO, G., SU, H., XU, J., AND XU, K. Implicit high-order gas kinetic scheme for turbulence simulation. *Aerosp. Sci. Technol.* 92 (2019), 958–971.
- [24] CARAMANA, E. J., SHASHKOV, M. J., AND WHALEN, P. P. Formulations of Artificial Viscosity for Multi-dimensional Shock Wave Computations. *J. Comput. Phys.* 144, 1 (1998), 70–97.
- [25] CERCIGNANI, C. *Mathematical methods in kinetic theory*, vol. 1. Springer, 1969.
- [26] ÇETINKAYA, A., AND ORAL ÜNAL, U. A computational study into the effect of the winglets on the performance of fully submerged hydrofoils. *Appl. Ocean Res.* 104 (2020), 102357.
- [27] CHAPMAN, S., AND COWLING, T. G. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [28] CHEN, H., FILIPPOVA, O., HOCH, J., MOLVIG, K., SHOCK, R., TEIXEIRA, C., AND ZHANG, R. Grid refinement in lattice Boltzmann methods based on volumetric formulation. *Physica A* 362, 1 (2006), 158–167.
- [29] CHEN, J., LIU, S., WANG, Y., AND ZHONG, C. Conserved discrete unified gas-kinetic scheme with unstructured discrete velocity space. *Phys. Rev. E* 100, 4 (2019), 43305.
- [30] CHEN, T., WEN, X., WANG, L. P., GUO, Z., WANG, J., AND CHEN, S. Simulation of three-dimensional compressible decaying isotropic turbulence using a redesigned discrete unified gas kinetic scheme. *Phys. Fluids* 32, 12 (2020).
- [31] CHERNYSHEV, S. L., LYAPUNOV, S. V., AND WOLKOV, A. V. Modern problems of aircraft aerodynamics. *Adv. Aerodyn.* 1, 1 (2019), 1–15.
- [32] CHEYLAN, I., ZHAO, S., BOIVIN, P., AND SAGAUT, P. Compressible pressure-based Lattice-Boltzmann applied to humid air with phase change. *Appl. Therm. Eng.* 191 (2021), 116868.
- [33] CHIKATAMARLA, S., AND KARLIN, I. Comment on “Rectangular lattice Boltzmann method”. *Phys. Rev. E* 83, 4 (2011).
- [34] CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Entropy and Galilean invariance of lattice Boltzmann theories. *Phys. Rev. Lett.* 97, 19 (2006).
- [35] CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Lattices for the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 79, 4 (2009).

- [36] CHOI, J. H., ALONSO, J. J., AND VAN DER WEIDE, E. T. Transonic flow analysis with discontinuous Galerkin method in SU2 DG-FEM solver. *AIAA Aviat. 2019 Forum*, June (2019), 1–15.
- [37] COLEMAN, G. N., KIM, J., AND MOSER, R. D. A numerical study of turbulent supersonic isothermal-wall channel flow. *J. Fluid Mech.* 305 (1995), 159–183.
- [38] COOK, A. W. Artificial fluid properties for large-eddy simulation of compressible turbulent mixing. *Phys. Fluids* 19, 5 (2007).
- [39] COOLS, R. Constructing cubature formulae: the science behind the art. *Acta Numer.* 6 (1997), 1–54.
- [40] COOLS, R. An encyclopaedia of cubature formulas. *J. Complex.* 19, 3 (2003), 445–453.
- [41] COOLS, R., HUYBRECHS, D., AND NUYENS, D. Recent topics in numerical integration. *Int. J. Quantum Chem.* 109, 8 (2009), 1748–1755.
- [42] COREIXAS, C. *High-order extension of the recursive regularized lattice Boltzmann method*. PhD thesis, INP Toulouse, 2018.
- [43] COREIXAS, C., AND LATT, J. Compressible lattice Boltzmann methods with adaptive velocity stencils: An interpolation-free formulation. *Phys. Fluids* 32, 11 (2020).
- [44] COREIXAS, C., WISSOCQ, G., PUIGT, G., BOUSSUGE, J.-F., AND SAGAUT, P. Recursive regularization step for high-order lattice Boltzmann methods. *Phys. Rev. E* 96, 3 (2017), 033306.
- [45] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., AND LEWY, H. Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. *Math. Ann.* 100, 1 (1928), 32–74.
- [46] CURTISS, C. F., AND HIRSCHFELDER, J. O. Integration of Stiff Equations. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 38, 3 (1952), 235–243.
- [47] DAHLQUIST, G. Convergence and stability in the numerical integration of ordinary differential equations. *Mathematica Scandinavica* (1956), 33–53.
- [48] DAHLQUIST, G. G. A special stability problem for linear multistep methods. *BIT Numerical Mathematics* 1963 3:1 3, 1 (1963), 27–43.
- [49] DARWISH, M., AND MOUKALLED, F. *The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab®*. Springer, 2021.
- [50] DELLAR, P. J. Incompressible limits of lattice Boltzmann equations using multiple relaxation times. *J. Comput. Phys.* 190, 2 (2003), 351–370.

- 
- [51] DELLAR, P. J. An interpretation and derivation of the lattice Boltzmann method using Strang splitting. *Comput. Math. with Appl.* 65, 2 (2013), 129–141.
- [52] DI ILIO, G., DORSCHNER, B., BELLA, G., SUCCI, S., AND KARLIN, I. V. Simulation of turbulent flows with the entropic multirelaxation time lattice Boltzmann method on body-fitted meshes. *J. Fluid Mech.* 849 (2018), 35–56.
- [53] DORSCHNER, B., BÖSCH, F., AND KARLIN, I. V. Particles on demand for kinetic theory. *Phys. Rev. Lett.* 121 (2018), 130602.
- [54] DORSCHNER, B., FRAPOLLI, N., CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Grid refinement for entropic lattice Boltzmann models. *Phys. Rev. E* 94 (2016), 053311.
- [55] DÜSTER, A., DEMKOWICZ, L., AND RANK, E. High-order finite elements applied to the discrete Boltzmann equation. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 67, 8 (2006), 1094–1121.
- [56] ESFAHANIAN, V., AND GHADYANI, M. Improvement of the instability of compressible lattice Boltzmann model by shock-detecting sensor. *J. Mech. Sci. Technol.* 29, 5 (2015), 1981–1991.
- [57] FAKHARI, A., AND LEE, T. Numerics of the lattice Boltzmann method on nonuniform grids: Standard LBM and finite-difference LBM. *Comput. Fluids* 107 (2015), 205–213.
- [58] FALCUCCI, G., AMATI, G., FANELLI, P., KRASDEV, V. K., POLVERINO, G., PORFIRI, M., AND SUCCI, S. Extreme flow simulations reveal skeletal adaptations of deep-sea sponges. *Nature* 595, July (2021).
- [59] FARES, E., WESSELS, M., LI, Y., GOPALAKRISHNAN, P., ZHANG, R., SUN, C., GOPALASWAMY, N., ROBERTS, P., HOCH, J., AND CHEN, H. Validation of a Lattice-Boltzmann approach for transonic and supersonic flow simulations. *52nd AIAA Aerosp. Sci. Meet. - AIAA Sci. Technol. Forum Expo. SciTech 2014*, January (2014), 1–17.
- [60] FENG, Y., GUO, S., JACOB, J., AND SAGAUT, P. Grid refinement in the three-dimensional hybrid recursive regularized lattice Boltzmann method for compressible aerodynamics. *Phys. Rev. E* 101, 6 (2020), 63302.
- [61] FENG, Y., SAGAUT, P., AND TAO, W. Q. A compressible lattice Boltzmann finite volume model for high subsonic and transonic flows on regular lattices. *Comput. Fluids* 131 (2016), 45–55.

- [62] FOYSI, H. *Transport passiver Skalare in wandgebundener und isotroper kompressibler isotroper kompressibler Turbulenz*. Dissertation, Technische Universität München, 2005.
- [63] FOYSI, H., SARKAR, S., AND FRIEDRICH, R. Compressibility effects and turbulence scalings in supersonic channel flow. *J. Fluid Mech.* 509, 509 (2004), 207–216.
- [64] FRAPOLLI, N. *Entropic lattice Boltzmann models for thermal and compressible flows*. PhD thesis, ETH Zürich, 2017.
- [65] FRAPOLLI, N., CHIKATAMARLA, S., AND KARLIN, I. Theory, analysis, and applications of the entropic lattice Boltzmann model for compressible flows. *Entropy* 22, 3 (2020), 370.
- [66] FRAPOLLI, N., CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Entropic lattice Boltzmann model for compressible flows. *Phys. Rev. E* 92, 6 (2015).
- [67] FRAPOLLI, N., CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Entropic lattice Boltzmann model for gas dynamics: Theory, boundary conditions, and implementation. *Phys. Rev. E* 93, 6 (2016), 063302.
- [68] FRAPOLLI, N., CHIKATAMARLA, S. S., AND KARLIN, I. V. Lattice Kinetic Theory in a Comoving Galilean Reference Frame. *Phys. Rev. Lett.* 117, 1 (2016), 10604.
- [69] FRISCH, U., HASSLACHER, B., AND POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys. Rev. Lett.* 56, 14 (1986), 1505–1508.
- [70] GALLIS, M. A., BITTER, N. P., KOEHLER, T. P., TORCZYNSKI, J. R., PLIMPTON, S. J., AND PAPADAKIS, G. Molecular-Level Simulations of Turbulence and Its Decay. *Phys. Rev. Lett.* 118, 6 (2017), 1–5.
- [71] GANESHAN, K., AND WILLIAMS, D. M. An implicit discontinuous Galerkin finite element discrete Boltzmann method for high Knudsen number flows. *Phys. Fluids* 33, 3 (2021).
- [72] GARNIER, E., ADAMS, N., AND SAGAUT, P. *Large eddy simulation for compressible flows*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [73] GEHRKE, M., JANSSEN, C., AND RUNG, T. Scrutinizing lattice Boltzmann methods for direct numerical simulations of turbulent channel flows. *Comput. Fluids*. 156 (2017), 247–263. Ninth International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD9).



- [74] GEIER, M., SCHÖNHERR, M., PASQUALI, A., AND KRAFCZYK, M. The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation. *Comput. Math. with Appl.* 70, 4 (2015), 507–547.
- [75] GEUZAIN, C., AND REMACLE, J. F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 79, 11 (2009), 1309–1331.
- [76] GINZBOURG, I., AND ADLER, P. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model. *J. Phys. II* 4, 2 (1994), 191–214.
- [77] GOTTLIEB, S., AND SHU, C.-W. Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Math. Comput. Am. Math. Soc.* 67, 221 (1998), 73–85.
- [78] GRAD, H. On the kinetic theory of rarefied gases. *Commun. Pure Appl. Math.* 2, 4 (1949), 331–407.
- [79] GUANGWU, Y., YAOSONG, C., AND SHOUXIN, H. Simple lattice Boltzmann model for simulating flows with shock wave. *Phys. Rev. E* 59, 1 (1999), 454–459.
- [80] GUO, S., FENG, Y., JACOB, J., RENARD, F., AND SAGAUT, P. An efficient lattice Boltzmann method for compressible aerodynamics on D3Q19 lattice. *J. Comput. Phys.* 418 (2020), 109570.
- [81] GUO, S., FENG, Y., AND SAGAUT, P. Improved standard thermal lattice boltzmann model with hybrid recursive regularization for compressible laminar and turbulent flows. *Phys. Fluids* 32, 12 (2020), 126108.
- [82] GUO, Z., AND SHU, C. *Lattice Boltzmann method and its application in engineering*, vol. 3. World Scientific, 2013.
- [83] GUO, Z., WANG, R., AND XU, K. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows. II. Thermal compressible case. *Phys. Rev. E* 91, 3 (2015), 033313.
- [84] GUO, Z., XU, K., AND WANG, R. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows: Low-speed isothermal case. *Phys. Rev. E* 88, 3 (2013), 033305.
- [85] HAEGEMANS, A., AND PIESSENS, R. Construction of cubature formulas of degree seven and nine symmetric planar regions, using orthogonal polynomials. *SIAM J. Numer. Anal.* 14, 3 (1977), 492–508.
- [86] HAFEZ, M., AND WAHBA, E. Simulations of viscous transonic flows over lifting airfoils and wings. *Comput. Fluids* 36, 1 (2007), 39–52.

- [87] HAMZEHLOO, A., LUSHER, D. J., LAIZET, S., AND SANDHAM, N. D. On the performance of WENO/TENO schemes to resolve turbulence in DNS/LES of high-speed compressible flows. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 93, 1 (2021), 176–196.
- [88] HÄNEL, D. *Molekulare Gasdynamik: Einführung in die kinetische Theorie der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden*. Springer, Berlin, 2004.
- [89] HARPOLE, A., ZINGALE, M., HAWKE, I., AND CHEGINI, T. Pyro: a framework for hydrodynamics explorations and prototyping. *J. Open Source Softw.* 4, 34 (2019), 1265.
- [90] HAUSSMANN, M., SIMONIS, S., NIRSCHL, H., AND KRAUSE, M. J. Direct numerical simulation of decaying homogeneous isotropic turbulence — numerical experiments on stability, consistency and accuracy of distinct lattice Boltzmann methods. *Int. J. Mod. Phys. C* 30, 09 (2019), 1950074.
- [91] HE, X., AND LUO, L. S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E* 55, 6 (1997), 6811–6820.
- [92] HEGELE, L. A., MATTILA, K., AND PHILIPPI, P. C. Rectangular lattice-Boltzmann schemes with BGK-collision operator. *J. Sci. Comput.* 56, 2 (2013), 230–242.
- [93] HEJRANFAR, K., AND EZZATNESHAN, E. Implementation of a high-order compact finite-difference lattice Boltzmann method in generalized curvilinear coordinates. *J. Comput. Phys.* 267 (2014), 28–49.
- [94] HEJRANFAR, K., AND GHAFFARIAN, A. A spectral difference lattice Boltzmann method for solution of inviscid compressible flows on structured grids. *Comput. Math. with Appl.* 72, 5 (2016), 1341–1368.
- [95] HELTAI, L., BANGERTH, W., KRONBICHLER, M., AND MOLA, A. Propagating Geometry Information to Finite Element Computations. *ACM Trans. Math. Software* 47, 4 (2021).
- [96] HEUBES, D., BARTEL, A., AND EHRHARDT, M. Characteristic boundary conditions in the lattice Boltzmann method for fluid and gas dynamics. *J. Comput. Appl. Math.* 262 (2014), 51–61.
- [97] HIDA, K. An Approximate Study on the Detached Shock Wave in front of a Circular Cylinder and a Sphere. *J. Phys. Soc. Jpn.* 8, 6 (1953), 740–745.
- [98] HIRSCHL, E. H., AND WEILAND, C. *Selected Aerothermodynamic Design Problems of Hypersonic Flight Vehicles*. Springer, Berlin, 2009.

- [99] HOSSEINI, S. A., COREIXAS, C., DARABIHA, N., AND THÉVENIN, D. Extensive analysis of the lattice Boltzmann method on shifted stencils. *Phys. Rev. E* 100, 6 (2019), 1–15.
- [100] HUGHES, T. J., MAZZEI, L., OBERAI, A. A., AND WRAY, A. A. The multiscale formulation of large eddy simulation: Decay of homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Fluids* 13, 2 (2001), 505–512.
- [101] HUYBRECHS, D. Stable high-order quadrature rules with equidistant points. *J. Comput. Appl. Math.* 231, 2 (2009), 933–947.
- [102] HUYNH, H. T. A flux reconstruction approach to high-order schemes including discontinuous galerkin methods. In *18th AIAA computational fluid dynamics conference* (2007), p. 4079.
- [103] INOUE, O., AND HATTORI, Y. Sound generation by shock-vortex interactions. *J. Fluid Mech.* 380 (1999), 81–116.
- [104] IYER, A. S., ABE, Y., VERMEIRE, B. C., BECHLARS, P., BAIER, R. D., JAMESON, A., WITHERDEN, F. D., AND VINCENT, P. E. High-order accurate direct numerical simulation of flow over a MTU-T161 low pressure turbine blade. *Comput. Fluids* 226 (2021), 104989.
- [105] JOHNSEN, E., LARSSON, J., BHAGATWALA, A. V., CABOT, W. H., MOIN, P., OLSON, B. J., RAWAT, P. S., SHANKAR, S. K., SJÖGREEN, B., YEE, H. C., ZHONG, X., AND LELE, S. K. Assessment of high-resolution methods for numerical simulations of compressible turbulence with shock waves. *J. Comput. Phys.* (2010).
- [106] JONNALAGADDA, A., SHARMA, A., AND AGRAWAL, A. Onsager-regularized lattice Boltzmann method: A nonequilibrium thermodynamics-based regularized lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 104, 1 (2021), 015313.
- [107] KALLIKOUNIS, N. G., DORSCHNER, B., AND KARLIN, I. V. Multiscale semi-Lagrangian lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 103 (2021), 63305.
- [108] KAPLAN, C. R., ORAN, E. S., AND AGGARWAL, U. *Reducing statistical scatter in DSMC solutions of hypersonic ionizing flows*. 46th AIAA Thermophys. Conf., 2016, ch. 1, p. 1.
- [109] KARLIN, I. V., BÖSCH, F., AND CHIKATAMARLA, S. S. Gibbs’ principle for the lattice-kinetic theory of fluid dynamics. *Phys. Rev. E* 90, 3 (2014), 1–5.
- [110] KARLIN, I. V., FERRANTE, A., AND ÖTTINGER, H. C. Perfect entropy functions of the Lattice Boltzmann method. *Europhys. Lett.* 47, 2 (1999), 182–188.

- [111] KATAOKA, T., AND TSUTAHARA, M. Lattice Boltzmann method for the compressible Euler equations. *Phys. Rev. E* 69, 5 (2004), 14.
- [112] KONYAEV, S. Ninth-order quadrature formulas invariant with respect to the icosahedral group. *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 233, 5 (1977), 784–787.
- [113] KRÄMER, A. *Lattice-Boltzmann-Methoden zur Simulation inkompressibler Wirbelströmungen*. Doktorarbeit, Universität Siegen, 2017.
- [114] KRÄMER, A., KÜLLMER, K., REITH, D., JOPPICH, W., AND FOYSI, H. Semi-Lagrangian off-lattice Boltzmann method for weakly compressible flows. *Phys. Rev. E* 95, 2 (2017).
- [115] KRÄMER, A., WILDE, D., KÜLLMER, K., REITH, D., AND FOYSI, H. Pseudentropic derivation of the regularized lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 100, 2 (2019), 023302.
- [116] KRÄMER, A., WILDE, D., KÜLLMER, K., REITH, D., FOYSI, H., AND JOPPICH, W. Lattice Boltzmann simulations on irregular grids: Introduction of the NATriuM library. *Comput. Math. with Appl.* 79, 1 (2020), 34–54.
- [117] KRAUSE, M. J. *Fluid Flow Simulation and Optimisation with Lattice Boltzmann Methods on High Performance Computers - Application to the Human Respiratory System*. Doktorarbeit, Karlsruher Institut für Technologie, 2010.
- [118] KRAUSE, M. J., KUMMERLÄNDER, A., AVIS, S. J., KUSUMAATMAJA, H., DAPELO, D., KLEMENS, F., GAEDTKE, M., HAFEN, N., MINK, A., TRUNK, R., MARQUARDT, J. E., MAIER, M. L., HAUSSMANN, M., AND SIMONIS, S. OpenLB—Open source lattice Boltzmann code. *Comput. Math. with Appl.* 81 (2021), 258–288.
- [119] KRIVODONOVA, L. An efficient local time-stepping scheme for solution of nonlinear conservation laws. *J. Comput. Phys.* 229, 22 (2010), 8537–8551.
- [120] KRONBICHLER, M., AND KORMANN, K. Fast matrix-free evaluation of discontinuous Galerkin finite element operators. *ACM Trans. Math. Softw.* 45, 3 (2019).
- [121] KRÜGER, T., KUSUMAATMAJA, H., KUZMIN, A., SHARDT, O., SILVA, G., AND VIGGEN, E. M. *The lattice Boltzmann method: Principles and practice*. Springer, Berlin, 2017.
- [122] KÜLLMER, K. *Pseudopotentialbasierte Lattice-Boltzmann-Verfahren für Mehrphasenströmungen*. Doktorarbeit, Universität Siegen, 2019.

- [123] KUPERSHTOKH, A. L., MEDVEDEV, D. A., AND KARPOV, D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method. *Comput. Math. with Appl.* 58, 5 (2009), 965–974.
- [124] KURGANOV, A., AND TADMOR, E. Solution of two-dimensional Riemann problems for gas dynamics without Riemann problem solvers. *Numer. Methods Partial Differ. Equ.* 18, 5 (2002), 584–608.
- [125] LAGRAVA, D., MALASPINAS, O., LATT, J., AND CHOPARD, B. Advances in multi-domain lattice Boltzmann grid refinement. *J. Comput. Phys.* 231, 14 (2012), 4808–4822.
- [126] LALLEMAND, P., AND LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Phys. Rev. E* 61 (2000), 6546–6562.
- [127] LALLEMAND, P., LUO, L.-S., KRAFCZYK, M., AND YONG, W.-A. The Lattice Boltzmann Method for Nearly Incompressible Flows. *J. Comput. Phys.* (2020), 109713.
- [128] LARSSON, J. Effect of shock-capturing errors on turbulence statistics. *AIAA Journal* 48, 7 (2010), 1554–1557.
- [129] LATT, J., AND CHOPARD, B. Lattice Boltzmann method with regularized pre-collision distribution functions. *Math. Comput. Simul* 72, 2-6 (2006), 165–168.
- [130] LATT, J., COREIXAS, C., BENY, J., AND PARMIGIANI, A. Efficient supersonic flow simulations using lattice Boltzmann methods based on numerical equilibria. *Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 378, 2175 (2020), 20190559.
- [131] LAX, P., AND LIU, X. Solution of two-dimensional riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM J. Sci. Comput.* 19, 2 (1998), 319–340.
- [132] LEE, S., LELE, S. K., AND MOIN, P. Interaction of isotropic turbulence with shock waves: effect of shock strength. *J. Fluid Mech.* 340 (1997), 225–247.
- [133] LELE, S. K. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.* 103, 1 (1992), 16–42.
- [134] LI, Q., HE, Y., WANG, Y., AND TAO, W. Coupled double-distribution-function lattice Boltzmann method for the compressible Navier-Stokes equations. *Phys. Rev. E* 76, 5 (2007), 056705.
- [135] LI, Y., LEBŒUF, E. J., AND BASU, P. K. Least-squares finite-element scheme for the lattice Boltzmann method on an unstructured mesh. *Phys. Rev. E* 72, 4 (2005).

- [136] LI, Z. H., AND ZHANG, H. X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *J. Comput. Phys.* 228, 4 (2009), 1116–1138.
- [137] LIU, Q., AND LAI, H. Coherent structures in a compressible turbulent plane jet. *Phys. Fluids* 33, 10 (2021), 105109.
- [138] LIU, X.-D., OSHER, S., AND CHAN, T. Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes. *J. Comput. Phys.* 115, 1 (1994), 200–212.
- [139] LIU, Y. Y., SHU, C., ZHANG, H. W., AND YANG, L. M. An efficient high-order least square-based finite difference-finite volume method for solution of compressible Navier-Stokes equations on unstructured grids. *Comput. Fluids* 222 (2021), 104926.
- [140] LÖHNER, R. Towards overcoming the LES crisis. *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* 33, 3 (2019), 87–97.
- [141] LÖHNER, R., OTHMER, C., MROSEK, M., FIGUEROA, A., AND DEGRO, A. Overnight industrial LES for external aerodynamics. *Comput. Fluids* 214 (2021), 104771.
- [142] LUSHER, D. J., AND SANDHAM, N. D. Assessment of low-dissipative shock-capturing schemes for the compressible Taylor–Green vortex. *AIAA J.* 59, 2 (2021), 533–545.
- [143] MATHEW, J., LECHNER, R., FOYSI, H., SESTERHENN, J., AND FRIEDRICH, R. An explicit filtering method for large eddy simulation of compressible flows. *Phys. Fluids* 15, 8 (2003), 2279–2289.
- [144] MATTILA, K. K., PHILIPPI, P. C., AND HEGELE, L. A. High-order regularization in lattice-Boltzmann equations. *Phys. Fluids* 29, 4 (2017).
- [145] MCCORQUODALE, P., AND COLELLA, P. A high-order finite-volume method for conservation laws on locally refined grids. *Commun. Appl. Math. Comput. Sci.* 6, 1 (2011), 1–25.
- [146] MEIBURG, E. Comparison of the molecular dynamics method and the direct simulation Monte Carlo technique for flows around simple geometries. *Phys. Fluids* 29, 10 (1986), 3107.
- [147] MEURER, A., SMITH, C. P., PAPROCKI, M., CERTÍK, O., KIRPICHEV, S. B., ROCKLIN, M., KUMAR, A., IVANOV, S., MOORE, J. K., SINGH, S., RATHNAYAKE, T., VIG, S., GRANGER, B. E., MULLER, R. P., BONAZZI, F., GUPTA, H., VATS, S., JOHANSSON, F., PEDREGOSA, F., CURRY, M. J., TERREL, A. R., ROUCKA, S., SABOO, A., FERNANDO, I., KULAL, S., CIMRMAN, R.,

- AND SCOPATZ, A. Sympy: symbolic computing in python. *Peer. J. Computer Science* 3 (2017), 103.
- [148] MIEUSSENS, L. A survey of deterministic solvers for rarefied flows (Invited). *AIP Conference Proceedings 1628* (2014), 943–951.
- [149] MODESTI, D., AND PIROZZOLI, S. Reynolds and mach number effects in compressible turbulent channel flow. *Int. J. Heat Fluid Flow* 59 (2016), 33–49.
- [150] MÖLLER, H. M. *Lower Bounds for the Number of Nodes in Cubature Formulae*. Birkhäuser Basel, Basel, 1979, pp. 221–230.
- [151] MOSS, J. N., AND BIRD, G. A. Direct Simulation of Transitional Flow for Hypersonic Reentry Conditions. *AIAA Pap.* 40, 5 (1984), 830–843.
- [152] NAGATA, T., NONOMURA, T., TAKAHASHI, S., AND FUKUDA, K. Direct numerical simulation of subsonic, transonic and supersonic flow over an isolated sphere up to a Reynolds number of 1000. *J. Fluid Mech.* (2020).
- [153] NAGATA, T., NONOMURA, T., TAKAHASHI, S., MIZUNO, Y., AND FUKUDA, K. Investigation on subsonic to supersonic flow around a sphere at low Reynolds number of between 50 and 300 by direct numerical simulation. *Phys. Fluids* 28, 5 (2016).
- [154] NATHEN, P., GAUDLITZ, D., KRAUSE, M. J., AND ADAMS, N. A. On the Stability and Accuracy of the BGK, MRT and RLB Boltzmann Schemes for the Simulation of Turbulent Flows. *Comm. Comput. Phys.* 23, 3 (2018).
- [155] NIE, X., SHAN, X., AND CHEN, H. Thermal lattice Boltzmann model for gases with internal degrees of freedom. *Phys. Rev. E* 77, 3 (2008), 1–4.
- [156] NIE, X., SHAN, X., AND CHEN, H. A Lattice-Boltzmann / Finite-Difference Hybrid Simulation of Transonic Flow. *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, January (2009).
- [157] PACHALIEVA, A., AND WAGNER, A. J. Connecting lattice Boltzmann methods to physical reality by coarse-graining Molecular Dynamics simulations. *arXiv* (2021).
- [158] PAN, X., XU, A., ZHANG, G., AND JIANG, S. Lattice Boltzmann approach to high-speed compressible flows. *nt. J. Mod. Phys. C* 18, 11 (2007), 1747–1764.
- [159] PARK, N., YOO, J. Y., AND CHOI, H. Discretization errors in large eddy simulation: On the suitability of centered and upwind-biased compact difference schemes. *J. Comput. Phys.* 198, 2 (2004), 580–616.

- [160] PATIL, D., AND LAKSHMISHA, K. Finite volume TVD formulation of lattice Boltzmann simulation on unstructured mesh. *J. Comput. Phys.* 228, 14 (2009), 5262 – 5279.
- [161] PENG, N., AND YANG, Y. Effects of the Mach number on the evolution of vortex-surface fields in compressible Taylor-Green flows. *Phys. Rev. Fluids* 3, 1 (2018), 1–21.
- [162] PHILIPPI, P. C., HEGELE, L. A., DOS SANTOS, L. O., AND SURMAS, R. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Phys. Rev. E* 73, 5 (2006).
- [163] PIROZZOLI, S. Numerical methods for high-speed flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 43, 1 (2011), 163–194.
- [164] PRASANTH, P. S., AND KAKKASSERY, J. K. Direct simulation Monte Carlo (DSMC): A numerical method for transition-regime flows-A review. *J. Indian Inst. Sci.* 86, 3 (2006), 169–192.
- [165] PRASIANAKIS, N., KARLIN, I., MANTZARAS, J., AND BOULOUCOS, K. Lattice Boltzmann method with restored Galilean invariance. *Phys. Rev. E* 79, 6 (2009), 066702.
- [166] PRASIANAKIS, N. I., AND KARLIN, I. V. Lattice Boltzmann method for simulation of compressible flows on standard lattices. *Phys. Rev. E* 78, 1 (2008), 1–7.
- [167] QI, Y., CHEN, T., WANG, L.-P., GUO, Z., AND CHEN, S. An efficient discrete unified gas-kinetic scheme for compressible turbulence. *Phys. Fluids* 34, 11 (2022), 116101.
- [168] QU, K., SHU, C., AND CHEW, Y. T. Simulation of shock-wave propagation with finite volume lattice Boltzmann method. *Int. J. Mod. Phys. C* 18, 04 (2007), 447–454.
- [169] QU, K., SHU, C., AND CHEW, Y. T. An isoparametric transformation-based interpolation-supplemented lattice Boltzmann method and its application. *Mod. Phys. Lett. B* 24, 13 (2010), 1315–1318.
- [170] QU, K., SHU, C., AND CHEW, Y. T. Lattice Boltzmann and finite volume simulation of inviscid compressible flows with curved boundary. *Adv. Appl. Math. Mech.* 2, 5 (2010), 573–586.
- [171] REIDER, M. B., AND STERLING, J. D. Accuracy of discrete-velocity BGK models for the simulation of the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Fluids* 24, 4 (1995), 459–467.



- [172] RENARD, F., WISSOCQ, G., BOUSSUGE, J.-F., AND SAGAUT, P. A linear stability analysis of compressible hybrid lattice Boltzmann methods. *J. Comput. Phys.* *446* (2021), 110649.
- [173] RUBY, M., AND FOYSI, H. Active control of compressible channel flow up to  $Ma_b=3$  using direct numerical simulations with spanwise velocity modulation at the walls. *GAMM Mitteilungen* *45*, 1 (2022).
- [174] RYKOV, V. A. A model kinetic equation for a gas with rotational degrees of freedom. *Fluid Dyn.* *10*, 6 (1975), 959–966.
- [175] SAADAT, M. H., BÖSCH, F., AND KARLIN, I. V. Lattice Boltzmann model for compressible flows on standard lattices: Variable Prandtl number and adiabatic exponent. *Phys. Rev. E* *99*, 1 (2019), 013306.
- [176] SAADAT, M. H., BÖSCH, F., AND KARLIN, I. V. Semi-Lagrangian lattice Boltzmann model for compressible flows on unstructured meshes. *Phys. Rev. E* *101* (2020), 023311.
- [177] SAADAT, M. H., HOSSEINI, S. A., DORSCHNER, B., AND KARLIN, I. V. Extended lattice Boltzmann model for gas dynamics. *Phys. Fluids* *33*, 4 (2021), 046104.
- [178] SCHLÖMER, N., PAPIOR, N., ARNOLD, D., BLECHTA, J., AND ZETTER, R. nschloe/quadpy: 0.16.10, 2021.
- [179] SHAN, X. General solution of lattices for Cartesian lattice Bhatnagar-Gross-Krook models. *Phys. Rev. E* *81*, 3 (2010), 1–7.
- [180] SHAN, X. The mathematical structure of the lattices of the lattice Boltzmann method. *J. Comput. Sci.* *17* (2016), 475–481.
- [181] SHAN, X., AND HE, X. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. *Phys. Rev. Lett.* *80*, 1 (1998), 65–68.
- [182] SHAN, X., YUAN, X. F., AND CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: A way beyond the Navier-Stokes equation. *J. Fluid Mech.* *550*, -1 (2006), 413–441.
- [183] SHI, W., SHYY, W., AND MEI, R. Finite-difference-based lattice Boltzmann method for inviscid compressible flows. *Numer. Heat Transf. Part B Fundam.* *40*, 1 (2001), 1–21.
- [184] SHI, Y., WU, L., AND SHAN, X. Accuracy of high-order lattice Boltzmann method for non-equilibrium gas flow. *J. Fluid Mech.* (2020).

- [185] SHU, C. W. High-order finite difference and finite volume WENO schemes and discontinuous Galerkin methods for CFD. *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* 17, 2 (2003), 107–118.
- [186] SHU, C.-W., AND OSHER, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.* 77, 2 (1988), 439–471.
- [187] SIEBERT, D. N., HEGELE, L. A., AND PHILIPPI, P. C. Lattice Boltzmann equation linear stability analysis: Thermal and athermal models. *Phys. Rev. E* 77, 2 (2008).
- [188] SIMONIS, S., HAUSSMANN, M., KRONBERG, L., DÖRFLER, W., AND KRAUSE, M. J. Linear and brute force stability of orthogonal moment multiple-relaxation-time lattice Boltzmann methods applied to homogeneous isotropic turbulence. *Philos. Trans. R. Soc. A* 379, 2208 (2021), 20200405.
- [189] SIMONIS, S., OBERLE, D., GAEDTKE, M., JENNY, P., AND KRAUSE, M. J. Temporal large eddy simulation with lattice Boltzmann methods. *J. Comput. Phys.* 454 (2022), 110991.
- [190] SKORDOS, P. A. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 48 (1993), 4823–4842.
- [191] SOD, G. A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.* 27 (1978), 1–31.
- [192] SPILLER, D., AND DÜNWEG, B. Semiautomatic construction of lattice Boltzmann models. *Phys. Rev. E* 101, 4 (2020), 1–15.
- [193] STROUD, A. H. Quadrature Methods for Functions of More Than One Variable. *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 86, 3 (1960), 776–791.
- [194] STROUD, A. H. *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [195] STRUCHTRUP, H. Stable transport equations for rarefied gases at high orders in the Knudsen number. *Phys. Fluids* 16, 11 (2004), 3921–3934.
- [196] SU, M., XU, K., AND GHIDAOU, M. S. Low-Speed Flow Simulation by the Gas-Kinetic Scheme. *J. Comput. Phys.* (1999).
- [197] SUCCI, S. *The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond*. Oxford university press, 2001.
- [198] SUCCI, S. *The lattice Boltzmann equation: for complex states of flowing matter*. Oxford University Press, 2018.

- [199] SUN, C. Lattice-Boltzmann models for high speed flows. *Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.* 58, 6 (1998), 7283–7287.
- [200] SUN, C. Simulations of Compressible Flows with Strong Shocks by an Adaptive Lattice Boltzmann Model. *J. Comput. Phys.* 161, 1 (2000), 70–84.
- [201] SUN, C., AND HSU, A. T. Three-dimensional lattice Boltzmann model for compressible flows. *Phys. Rev. E* 68, 1 (2003), 14.
- [202] SUN, Y., AND SMITH, H. Review and prospect of supersonic business jet design. *Prog. Aerosp. Sci.* 90, October (2017), 12–38.
- [203] SURMAS, R., PICO ORTIZ, C. E., AND PHILIPPI, P. C. Simulating thermo-hydrodynamics by finite difference solutions of the Boltzmann equation. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 171, 1 (2009), 81–90.
- [204] TAMURA, A., OKUYAMA, K., TAKAHASHI, S., AND OHTSUKA, M. Three-dimensional discrete-velocity BGK model for the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Fluids* 40, 1 (2011), 149–155.
- [205] TORRILHON, M., AND STRUCHTRUP, H. Regularized 13-moment equations: Shock structure calculations and comparison to Burnett models. *J. Fluid Mech.* 513 (2004), 171–198.
- [206] TREFETHEN, L. N. Exactness of quadrature formulas. *arXiv* (2021).
- [207] UBERTINI, S., ASINARI, P., AND SUCCI, S. Three ways to lattice Boltzmann: A unified time-marching picture. *Phys. Rev. E* 81, 1 (2010), 1–11.
- [208] UBERTINI, S., AND SUCCI, S. A generalised Lattice Boltzmann equation on unstructured grids. *Commun. Comput. Phys.* 3, 2 (2008), 342–356.
- [209] VAHALA, G., PAVLO, P., VAHALA, L., AND MARTYS, N. Thermal Lattice-Boltzmann Model (TLBM) for Compressible Flows. *Int. J. Mod. Phys. C* 9, 8 (1998), 1247–1262.
- [210] VAN ZANDT, J. R. Efficient cubature rules. *ETNA - Electron. Trans. Numer. Anal.* 51 (2019), 219–239.
- [211] WANG, J., CHEN, L., KANG, Q., AND RAHMAN, S. S. The lattice Boltzmann method for isothermal micro-gaseous flow and its application in shale gas flow: A review. *Int. J. Heat Mass Transfer* 95 (2016), 94–108.
- [212] WANG, P., HO, M. T., WU, L., GUO, Z., AND ZHANG, Y. A comparative study of discrete velocity methods for low-speed rarefied gas flows. *Comput. Fluids* 161 (2018), 33–46.

- [213] WANG, Z. J. A perspective on high-order methods in computational fluid dynamics. *Sci. China Physics, Mech. Astron.* 59, 1 (2016), 1–6.
- [214] WANG, Z. J., FIDKOWSKI, K., ABGRALL, R., BASSI, F., CARAENI, D., CARY, A., DECONINCK, H., HARTMANN, R., HILLEWAERT, K., HUYNH, H. T., KROLL, N., MAY, G., PERSSON, P. O., VAN LEER, B., AND VISBAL, M. High-order CFD methods: Current status and perspective. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 72, 8 (2013), 811–845.
- [215] WATARI, M. Finite difference lattice Boltzmann method with arbitrary specific heat ratio applicable to supersonic flow simulations. *Physica A* 382, 2 (2007), 502–522.
- [216] WATARI, M., AND TSUTAHARA, M. Two-dimensional thermal model of the finite-difference lattice Boltzmann method with high spatial isotropy. *Phys. Rev. E* (2003), 1–7.
- [217] WEN, X., WANG, L. P., AND GUO, Z. Designing a consistent implementation of the discrete unified gas-kinetic scheme for the simulation of three-dimensional compressible natural convection. *Phys. Fluids* 33, 4 (2021).
- [218] WILDE, D., KRÄMER, A., BEDRUNKA, M., REITH, D., AND FOYSI, H. Cubature rules for weakly and fully compressible off-lattice Boltzmann methods. *J. Comput. Sci.* (2021), 101355.
- [219] WILDE, D., KRÄMER, A., KÜLLMER, K., FOYSI, H., AND REITH, D. Multistep lattice Boltzmann methods: Theory and applications. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 90, 3 (2019), 156–169.
- [220] WILDE, D., KRÄMER, A., REITH, D., AND FOYSI, H. Semi-Lagrangian lattice Boltzmann method for compressible flows. *Phys. Rev. E* 101, 5 (2020), 053306.
- [221] WILDE, D., KRÄMER, A., REITH, D., AND FOYSI, H. High-order semi-lagrangian kinetic scheme for compressible turbulence. *Phys. Rev. E* 104, 2 (2021), 025301.
- [222] WOLF-GLADROW, D. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: an introduction*. Springer, 2004.
- [223] XU, K., AND HUANG, J. C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *J. Comput. Phys.* 229, 20 (2010), 7747–7764.
- [224] XU, K., MARTINELLI, L., AND JAMESON, A. Gas-kinetic finite volume methods, flux-vector splitting, and artificial diffusion. *J. Comput. Phys.* 120, 1 (1995), 48–65.

- [225] YAN, Z. G., PAN, Y., CASTIGLIONI, G., HILLEWAERT, K., PEIRÓ, J., MOXEY, D., AND SHERWIN, S. J. Nektar++: Design and implementation of an implicit, spectral/hp element, compressible flow solver using a Jacobian-free Newton Krylov approach. *Comput. Math. with Appl.* 81 (2021), 351–372.
- [226] YANG, L., SHU, C., WU, J., AND WANG, Y. Numerical simulation of flows from free molecular regime to continuum regime by a dvm with streaming and collision processes. *J. Comput. Phys.* 306 (2016), 291–310.
- [227] YAO, J., AND HUSSAIN, F. Turbulence statistics and coherent structures in compressible channel flow. *Phys. Rev. Fluids* 5, 8 (2020), 84603.
- [228] YUAN, Z., YANG, L., SHU, C., LIU, Z., AND LIU, W. A novel gas kinetic flux solver for simulation of continuum and slip flows. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 93, 9 (2021), 2863–2888.
- [229] ZAKIROV, A. V., KORNEEV, B. A., LEVCHENKO, V. D., AND PEREPELKINA, A. Y. On the conservativity of the Particles-on-Demand method for solution of the Discrete Boltzmann Equation. *Keldysh Inst. Prepr.*, 35-e (2019), 1–19.
- [230] ZHANG, P., AND XIA, Z. Contribution of viscous stress work to wall heat flux in compressible turbulent channel flows. *Phys. Rev. E* 102, 4 (2020), 43107.
- [231] ZHONG, X. High-Order Finite-Difference Schemes for Numerical Simulation of Hypersonic Boundary-Layer Transition. *J. Comput. Phys.* 144, 2 (1998), 662–709.
- [232] ZHOU, J. G. Rectangular lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E* 81, 2 (2010), 1–10.
- [233] ZIPUNOVA, E., PEREPELKINA, A., AND ZAKIROV, A. Applicability of regularized particles-on-demand method to solve Riemann problem. *J. Phys. Conf. Ser.* 1740, 1 (2021).
- [234] ZIPUNOVA, E., PEREPELKINA, A., ZAKIROV, A., AND KHILKOV, S. Regularization and the particles-on-demand method for the solution of the discrete Boltzmann equation. *J. Comput. Sci.* 53 (2021), 101376.